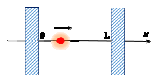


MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

Erwin Schrödinger (1927): ad una particella si può associare una *funzione d'onda* $\psi(x,y,z)$ che consente di calcolare la *probabilità* di trovare la particella in una determinata regione di spazio.

Es. nel caso di una particella di massa (m) che si muove in una sola dimensione (x), confinata su una lunghezza L dall'effetto di un'energia potenziale $V(x)$, l'equazione di Schrödinger assume la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$



in cui la *funzione d'onda* ψ dipende solo da x e il suo quadrato $\psi(x)^2$ esprime la *probabilità* di trovare l'elettrone nel punto di coordinata x (essendo $0 \leq x \leq L$)

Analogamente, nelle tre dimensioni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dz^2} \right) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dz^2} \right) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

Le incognite dell'equazione di Schrödinger sono le energie (E) permesse per la particella e le corrispondenti funzioni d'onda $\psi(x,y,z)$

Se la particella è confinata nello spazio:

- l'equazione ha soluzioni solo quando E assume certi valori discreti (*autovalori*)
- le corrispondenti funzioni d'onda ψ (*autofunzioni*), che si annullano al di fuori della regione in cui la particella è confinata, descrivono gli *stati stazionari* consentiti per la particella

E e ψ sono caratterizzate da numeri interi caratteristici (*numeri quantici*)

Vediamo un modo simbolico di scrivere l'equazione che esprime questi concetti nel caso in cui si abbia un solo numero quantico (n)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2 \psi(x,y,z)}{dz^2} \right) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

$$H \Psi_n(x,y,z) = E \Psi_n(x,y,z)$$

dove
$$H = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right]$$

è l'**operatore Hamiltoniano** ed n è il numero quantico caratteristico che definisce gli autovalori (E_n) e le autofunzioni (Ψ_n) consentite

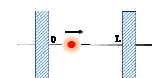
N.B. n scaturisce dalla soluzione dell'equazione

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

Particella in una scatola monodimensionale

Nel caso di una particella di massa (m) che si muove in una sola dimensione (x), confinata in un segmento (di lunghezza L) dall'effetto di un'energia potenziale $V(x)$, che vale zero dentro la scatola ($0 \leq x \leq L$) e infinito fuori di essa ($0 > x > L$) la soluzione dell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$



fornisce i seguenti risultati:

AUTOVALORI
 $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$

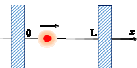
AUTOFUNZIONI
 $\Psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \text{sen}(n\pi x/L)$

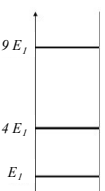
con la condizione di quantizzazione: $n=1,2,3 \dots \infty$ (**N.B.** non $n=0$)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
Particella in una scatola monodimensionale

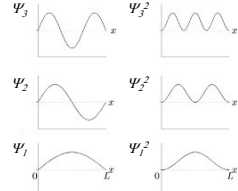
AUTOVALORI
 $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$
 $E_n = n^2 E_1$
 $n=1,2,3,\dots\infty$ (N.B. non $n=0$)

AUOFUNZIONI
 $\Psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \text{sen}(n\pi x/L)$

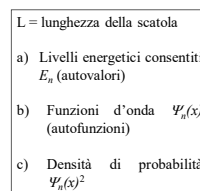




(a)



(b)



(c)

$L =$ lunghezza della scatola

a) Livelli energetici consentiti E_n (autovalori)

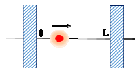
b) Funzioni d'onda $\Psi_n(x)$ (autofunzioni)

c) Densità di probabilità $\Psi_n(x)^2$

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
Particella in una scatola monodimensionale

AUTOVALORI
 $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$
 $E_n = n^2 E_1$
 $n=1,2,3,\dots\infty$ (N.B. non $n=0$)

AUOFUNZIONI
 $\Psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \text{sen}(n\pi x/L)$

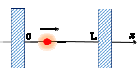


| Mondo nanoscopico | | | | |
|-------------------|---------|-----|-----------------|--|
| m_i (kg) | L (m) | n | E_n (rel. u.) | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 1 | 0,60 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 2 | 2,41 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 3 | 5,42 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 4 | 9,64 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 5 | 15,06 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 6 | 21,69 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 7 | 29,52 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 8 | 38,56 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 9 | 48,80 | |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 10 | 60,24 | |

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
Particella in una scatola monodimensionale

AUTOVALORI
 $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$
 $E_n = n^2 E_1$
 $n=1,2,3,\dots\infty$ (N.B. non $n=0$)

AUOFUNZIONI
 $\Psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \text{sen}(n\pi x/L)$

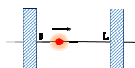


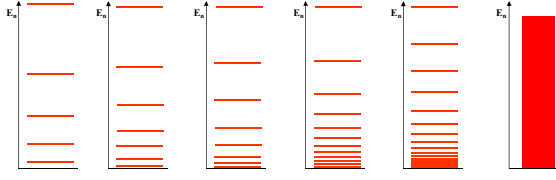
| Mondo nanoscopico | | | | Mondo macroscopico | | | |
|-------------------|---------|-----|-----------------|--------------------|---------|-----|-----------------|
| m_i (kg) | L (m) | n | E_n (rel. u.) | m (kg) | L (m) | n | E_n (rel. u.) |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 1 | 0,60 | 1,00E-06 | 0,01 | 1 | 5,49E-41 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 2 | 2,41 | 1,00E-06 | 0,01 | 2 | 2,20E-40 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 3 | 5,42 | 1,00E-06 | 0,01 | 3 | 4,94E-40 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 4 | 9,64 | 1,00E-06 | 0,01 | 4 | 8,78E-40 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 5 | 15,06 | 1,00E-06 | 0,01 | 5 | 1,37E-39 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 6 | 21,69 | 1,00E-06 | 0,01 | 6 | 1,98E-39 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 7 | 29,52 | 1,00E-06 | 0,01 | 7 | 2,69E-39 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 8 | 38,56 | 1,00E-06 | 0,01 | 8 | 3,51E-39 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 9 | 48,80 | 1,00E-06 | 0,01 | 9 | 4,45E-39 |
| 9,11E-31 | 1E-10 | 10 | 60,24 | 1,00E-06 | 0,01 | 10 | 5,49E-39 |

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
Particella in una scatola monodimensionale

AUTOVALORI
 $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$
 $E_n = n^2 E_1$
 $n=1,2,3,\dots\infty$ (N.B. non $n=0$)

AUOFUNZIONI
 $\Psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \text{sen}(n\pi x/L)$





Aumenta m e/o L

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Per l'atomo di **idrogeno** (H) e per gli atomi **idrogenoidi** (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} ...) l'equazione di Schrödinger

$$H \Psi_n(x,y,z) = E \Psi_n(x,y,z)$$

può essere risolta in modo esatto, fornendo tutti gli autovalori E_n e tutte le autofunzioni Ψ_n che descrivono completamente tutti gli stati stazionari dell'unico elettrone che si muove intorno al nucleo di carica Ze che genera un potenziale elettrostatico sferico espresso come $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r^2)$

Coordinate sferiche polari r , θ e ϕ

Funzione d'onda $\psi(r, \theta, \phi)$

Il suo quadrato $\psi(r, \theta, \phi)^2$ esprime la densità di probabilità di trovare l'elettrone nel punto P di coordinate $P(r, \theta, \phi)$

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Per l'atomo di **idrogeno** (H) e per gli atomi **idrogenoidi** (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} ...) le **funzioni d'onda** (autofunzioni) risultano come il prodotto di due funzioni

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Funzione radiale dipende solo da r e dai **numeri quantici** n e l
Funzione angolare dipende solo da θ e ϕ e dai **numeri quantici** l e m

- Numero quantico principale $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$
 - Numero quantico del momento angolare orbitale $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ (per ogni n)
 - Numero quantico magnetico $m = -l, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, l$ (per ogni l)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Per l'atomo di **idrogeno** (H) e per gli atomi **idrogenoidi** (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} ...) le **funzioni d'onda** (autofunzioni) risultano come il prodotto di due funzioni

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Funzione radiale dipende solo da r e dai **numeri quantici** n e l
Funzione angolare dipende solo da θ e ϕ e dai **numeri quantici** l e m

Ad ogni funzione d'onda (*orbitale*) corrisponde un valore dell'energia (*autovalore*) espressa come

$$E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2} \quad (\text{Bohr!})$$

N.B. dipende solo da n

- Numero quantico principale $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$
 - Numero quantico del momento angolare orbitale $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ (per ogni n)
 - Numero quantico magnetico $m = -l, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, l$ (per ogni l)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Per l'atomo di **idrogeno** (H) e per gli atomi **idrogenoidi** (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} ...) le **funzioni d'onda** (*orbitali*) risultano come il prodotto di due funzioni

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2}$$

a) Un *orbitale* è univocamente determinato da una terna di numeri quantici (n, l, m) ed ha un'energia caratteristica E_n
 b) Il *numero quantico principale* o *radiale* ($n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$) determina l'energia dello stato e identifica quindi i *livelli energetici* dell'atomo (dell'elettrone nell'atomo)
 c) Poiché l'energia dipende solo da n , tutti gli stati (n, l, m) con lo stesso valore di n , anche se aventi diversi valori di l e m , hanno la stessa energia ed appartengono quindi allo stesso *livello energetico*
 d) All'aumentare di n aumenta l'**energia** E_n del livello
 e) All'aumentare di n aumentano le **dimensioni** dell'orbitale (la regione di spazio in cui cade la massima probabilità di trovare l'elettrone si viene a trovare progressivamente più lontana dal nucleo)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Per l'atomo di **idrogeno** (H) e per gli atomi **idrogenoidi** (He⁺, Li²⁺, Be³⁺...) le **funzioni d'onda** (*orbitali*) risultano come il prodotto di due funzioni

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2}$$

- Il **numero quantico angolare** ($l = 0, 1, 2, 3 \dots n-1$, per ogni n) determina la **forma spaziale** di un orbitale
- Per convenzione il valore di l di un certo stato è indicato con una lettera (*stessa lettera = stessa forma*):

| | | | | | |
|-----------------|---|---|---|---|---|
| Valore di l : | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| Orbitale tipo: | s | p | d | f | g |
- Il **numero quantico magnetico** ($m = -l, \dots, -1, 0, 1, 2 \dots l$, per ogni l) determina l'orientazione nello spazio di orbitali aventi lo stesso valore di l (stessa forma)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Valori permessi dei numeri quantici l e m per i valori di n compresi fra 1 e 4

Notare il **numero di orbitali** in ogni strato (*o livello, o guscio*) elettronico n (pari a n^2) e in ogni sottostrato (*o sottolivello*) elettronico nl (pari a $2l + 1$)

| n | N. di orbitali nello strato n^2 | Valori permessi di l $l = n-1$ | Valori permessi di m $m = -l, \dots, 0, \dots, +l, +l$ | N. di orbitali nel sottostrato | Nome sottostrato |
|-----|-----------------------------------|-------------------------------------|---|--------------------------------|------------------|
| 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1s |
| 2 | 4 | 0 | 0 | 1 | 2s |
| | | 1 | -1, 0, 1 | 3 | 2p |
| 3 | 9 | 0 | 0 | 1 | 3s |
| | | 1 | -1, 0, 1 | 3 | 3p |
| | | 2 | -2, -1, 0, 1, 2 | 5 | 3d |
| 4 | 16 | 0 | 0 | 1 | 4s |
| | | 1 | -1, 0, 1 | 3 | 4p |
| | | 2 | -2, -1, 0, 1, 2 | 5 | 4d |
| | | 3 | -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 | 7 | 4f |

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici

Sequenza energetica degli strati, sottostrati ed orbitali permessi per i livelli da $n = 1$ a $n = 3$

Diagramma energetico degli orbitali degli atomi monoelettronici (idrogeno e atomi idrogenoidi) da $n = 1$ a $n = 3$

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici – rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali

- Per ogni valore di n, l e m , il quadrato della funzione d'onda (*orbitale*) $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ rappresenta la probabilità di trovare l'elettrone nei punti di coordinate r, θ e ϕ rispetto al nucleo (posto al centro di un sistema di assi cartesiani)
- Consideriamo separatamente la parte **radiale** e quella **angolare** dell'orbitale:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$
- Per la parte **radiale** si riporta la funzione $R_{n,l}(r)$, o il suo quadrato $R_{n,l}(r)^2$, che esprime la probabilità radiale (*dimensioni dell'orbitale*)
- Per la parte **angolare** si riporta la $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ o il suo quadrato $Y_{l,m}(\theta, \phi)^2$ in funzione di θ e ϕ *costante*, che esprime la probabilità angolare (*forma dell'orbitale*)
- Sono anche rappresentate le cosiddette **superfici di contorno**:
 - probabilità come «nuvola di punti»
 - identificazione di superfici di isodensità che definiscono volumi intorno al nucleo in cui è alta la probabilità di trovare l'elettrone (90, 95 o 99%)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
rappresentazione degli orbitali dell'atomo di idrogeno

$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo s: per gli orbitali di tipo s ($l = 0; m = 0$), la parte angolare $\Psi_{0,0}(\theta, \phi)$ non dipende da θ e da ϕ (orbitali a *simmetria sferica*), quindi conta solo la probabilità radiale $R_{n,0}(r)^2$

Per l'orbitale 1s si ha

Fig. a: probabilità radiale $R_{1,0}(r)^2$ lungo una direzione qualsiasi rispetto al nucleo

$a_0 =$ raggio di Bohr (pari a 0.529 \AA)

Fig. b: funzione di distribuzione radiale $P_{1,0}(r) = 4\pi r^2 R_{1,0}(r)^2$

$4\pi r^2$ (volume della calotta sferica di spessore dr)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
rappresentazione degli orbitali dell'atomo di idrogeno

$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

- L'orbitale 1s ha simmetria sferica, perciò può essere rappresentato da *superfici circolari di isodensità* in uno qualsiasi dei piani xy, xz o yz (Fig. a), oppure da una sfera nello spazio xyz (Fig. b)
- Tali superfici delimitano la porzione di piano o di spazio contenente il 99% della probabilità di trovare l'elettrone (in quel piano o nello spazio tridimensionale)

Distribuzione radiale di probabilità

(a)

(b)

(c)

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
rappresentazione degli orbitali dell'atomo di idrogeno

$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo ns: hanno tutti simmetria sferica, ma per $n > 1$ presentano $n - 1$ nodi (valori di r in cui la Ψ , e quindi anche Ψ^2 , si annullano)

Orbitale 2s

Orbitale 3s

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
rappresentazione degli orbitali dell'atomo di idrogeno

$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo ns: hanno tutti simmetria sferica, ma per $n > 1$ presentano $n - 1$ nodi (valori di r in cui la Ψ , e quindi anche Ψ^2 , si annullano)

Orbitale 1s
 $r = a_0 = 0.53 \text{ \AA}$

Orbitale 2s
 $r = 5.2 a_0 = 2.76$

Distribuzione di probabilità radiale

ORBITALE 1s: forma sferica con densità elettronica massima in corrispondenza del nucleo.


ORBITALE 2s: forma sferica con due regioni con densità elettronica alta, quella più lontana ($2.76 \times 10^{-10} \text{ m}$) ha un valore maggiore di probabilità radiale. Nodo a $1.3 \times 10^{-10} \text{ m}$.

ORBITALE 3s

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici – rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali


$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo ns: hanno tutti simmetria sferica, ma per $n > 1$ presentano $n - 1$ nodi (valori di r in cui la Ψ , e quindi anche Ψ^2 , si annullano)




1s

$n = 1$
 $l = 0$
 $m = 0$



2s

$n = 2$
 $l = 0$
 $m = 0$



3s

$n = 3$
 $l = 0$
 $m = 0$

Orbitali 1s, 2s, 3s.
Le dimensioni riportate sono proporzionali a quelle reali e dipendono dal numero quantico principale n . Con l'aumentare di n aumenta il raggio dell'orbitale e l'energia dell'elettrone che lo descrive.

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici – rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali





$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo p

- ($l = 1$) la funzione angolare ha tre componenti ($m = -1, 0, +1$)
- le tre funzioni $Y_{l,-1}(\theta, \phi)$, $Y_{l,0}(\theta, \phi)$ e $Y_{l,1}(\theta, \phi)$: **non** hanno simmetria sferica (sono identiche fra loro e «orientate» lungo gli assi x, y, z)

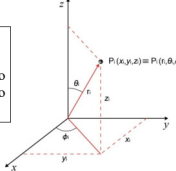
Es. per l'**orbitale** p_z , curve di isodensità nel piano xz ($\phi = 0$):

a) $Y_{p,z}(\theta, \phi)$ b) $Y_{p,z}(\theta, \phi)^2$

N.B.: rosso = valori positivi
 blu = valori negativi

N.B.: la probabilità è massima lungo l'asse z e nulla nel piano nodale xy



Dato che $Y_{p,z}(\theta, \phi)$ **non** risulta dipendente da ϕ , superfici di isodensità **nello spazio**:

c) $Y_{p,z}(\theta, \phi)$ d) $Y_{p,z}(\theta, \phi)^2$

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici – rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali

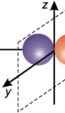

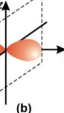
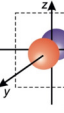
$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

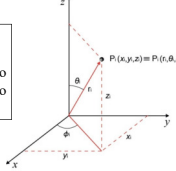
Orbitali di tipo p

- ($l = 1$) la funzione angolare ha tre componenti ($m = -1, 0, +1$)
- le tre funzioni $Y_{l,-1}(\theta, \phi)$, $Y_{l,0}(\theta, \phi)$ e $Y_{l,1}(\theta, \phi)$: **non** hanno simmetria sferica (sono identiche fra loro e «orientate» lungo gli assi x, y, z)

Analogamente, per gli **orbitali** p_x e p_y nello spazio tridimensionale risulta:

a) $Y_{p,x}(\theta, \phi)$ b) $Y_{p,x}(\theta, \phi)^2$ c) $Y_{p,y}(\theta, \phi)$ d) $Y_{p,y}(\theta, \phi)^2$




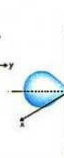


MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici – rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali

$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

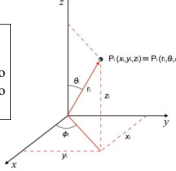
Orbitali di tipo p

- ($l = 1$) la funzione angolare ha tre componenti ($m = -1, 0, +1$)
- le tre funzioni $Y_{l,-1}(\theta, \phi)$, $Y_{l,0}(\theta, \phi)$ e $Y_{l,1}(\theta, \phi)$: **non** hanno simmetria sferica (sono identiche fra loro e «orientate» lungo gli assi x, y, z)

Rappresentazione dei tre orbitali p rispetto al nucleo atomico posto all'origine degli assi

ORBITALI P



MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
Atomi monoelettronici - funzioni d'onda per gli orbitali di tipo p

$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Tutti gli orbitali p ($n \geq 2, l = 1, m = -1, 0, +1$) hanno la stessa parte angolare dell'orbitale 2p e possono quindi essere rappresentati da superfici di isodensità aventi la stessa forma bilobata.

| ORBITALE | | | | | |
|---|-----|---------|--|---|-----------------|
| PARTE RADIALE E PRODOTTO DELLE PARTI ANGOLARI DI O. ATOMICI PER ATOMI IDROGENOIDI | | | | | |
| n | l | m | $R(r)$ | $\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ | livello |
| 1 | 0 | 0 | $2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{Zr}{a_0}\right]$ | $\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$ | 1s |
| 2 | 0 | 0 | $\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{Zr}{2a_0}\right]$ | $\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$ | 2s |
| 2 | 1 | 0 | $\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{Zr}{2a_0}\right]$ | $\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$ | 2p _z |
| 2 | 1 | ± 1 | $\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{Zr}{2a_0}\right]$ | $\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$ | 2p _x |
| 2 | 1 | ± 1 | $\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{Zr}{2a_0}\right]$ | $\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$ | 2p _y |

$a_0 = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m e^2}$

Tuttavia, all'aumentare di n , si riscontra un aumento delle *dimensioni* (e dell'*energia*) dell'orbitale, e quindi dell'estensione spaziale dei due lobi.

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici - rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali

$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo d

- ($l \geq 2$) la funzione angolare ha 5 componenti ($m = -2, -1, 0, +1, +2$)
- le 5 funzioni $Y_{l,-2}(\theta, \phi), Y_{l,-1}(\theta, \phi), Y_{l,0}(\theta, \phi), Y_{l,1}(\theta, \phi)$ e $Y_{l,2}(\theta, \phi)$ non hanno simmetria sferica

4 di questi orbitali sono *quadrilobati*, di cui:

- 3 hanno i lobi diretti lungo le bisettrici dei piani xy (orbitale d_{xy}), xz (orbitale d_{xz}) e yz (orbitale d_{yz})
- il quarto ha i 4 lobi diretto e lungo gli assi x e y (orbitale $d_{x^2-y^2}$)

Il quinto ha invece due lobi diretti lungo l'asse z, con una piccola densità aggiuntiva toroidale nel piano xy (orbitale d_{z^2})

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi monoelettronici - rappresentazioni di dimensione e forma degli orbitali

$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Orbitali di tipo f

- ($l \geq 3$) la funzione angolare ha 7 componenti ($m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$)
- le 7 funzioni $Y_{l,-3}(\theta, \phi), Y_{l,-2}(\theta, \phi), Y_{l,-1}(\theta, \phi), Y_{l,0}(\theta, \phi), Y_{l,1}(\theta, \phi), Y_{l,2}(\theta, \phi)$ e $Y_{l,3}(\theta, \phi)$ non hanno simmetria sferica

Hanno rilevanza solo nei lantanidi ($57 \leq Z \leq 71$) e negli attinidi ($89 \leq Z \leq 103$)
Ancora più marginale è il ruolo degli orbitali g ($l \geq 4$) o superiori

SPIN ELETTRONICO E NUMERO QUANTICO DI SPIN

L'equazione di Schrödinger non interpreta alcune evidenze sperimentali:

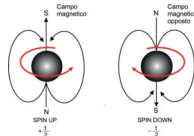
- ciascuna riga dello spettro dell'atomo di idrogeno è in realtà un *doppio* (due righe molto vicine fra di loro) se analizzate ad alta risoluzione
- Otto Stern e Walter Gerlach (1921)**: un fascio di atomi di argento, fatto passare in un opportuno campo magnetico, viene sdoppiato in due fasci distinti di uguale intensità

SPIN ELETTRONICO E NUMERO QUANTICO DI SPIN

L'unico elettrone non accoppiato degli atomi di argento (l'elettrone nell'orbitale 5s) si comporta *come se fosse* una piccola sfera ruotante su sé stessa attorno ad un asse (*dipolo magnetico*) i cui poli nord e sud sono allineati all'asse di rotazione.

Il momento angolare intrinseco dell'elettrone è detto *spin*, dall'inglese *to spin* (ruotare) e costituisce il quarto numero quantico, *numero quantico di spin* (*s*) associato all'elettrone

Può assumere solo due valori, convenzionalmente scelti pari a +1/2, detto spin su (↑), e -1/2 detto spin giù (↓)



Concludiamo dicendo che a ciascun elettrone della materia sono associati complessivamente 4 numeri quantici, tre dei quali (*n, l, m*) associati al suo moto orbitale attorno al nucleo dell'atomo cui appartiene ed uno (*s*) intrinseco ed associato al suo «moto» di spin.

**MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici**

- a) Negli atomi polielettronici, ciascun elettrone risente non solo dell'effetto attrattivo del nucleo, ma anche dell'effetto repulsivo degli altri elettroni
- b) L'equazione di Schrödinger deve tener conto di entrambi i contributi, ma ciò rende matematicamente impossibile la soluzione esatta dell'equazione
- c) Una soluzione *approssimata* del «moto» degli elettroni in un atomo polielettronico, si basa sul *metodo SCF* (Self-Consistent Field)
- d) Il metodo SCF assume che ogni elettrone si muove sottoposto ad un potenziale dovuto a due contributi; 1) l'attrazione esercitata dal nucleo e 2) la repulsione *media* esercitata da tutti gli altri elettroni
- e) Quindi, nell'equazione di Schrödinger il potenziale coulombiano di attrazione nucleare, $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r^2)$, è sostituito da un potenziale effettivo $V_{eff}(r)$ che tiene conto di questi due fattori, *ma che mantiene ancora una simmetria sferica*
- f) Questo approccio permette di scrivere le soluzioni di tale equazione classificandole con gli stessi tre numeri quantici *n, l* ed *m* visti per l'atomo di idrogeno
- g) Inoltre, gli orbitali di un atomo polielettronico possono ancora essere descritti come prodotto di una parte radiale e di una angolare, essendo in particolare quest'ultima esattamente identica a quella dell'atomo di idrogeno

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}^*(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

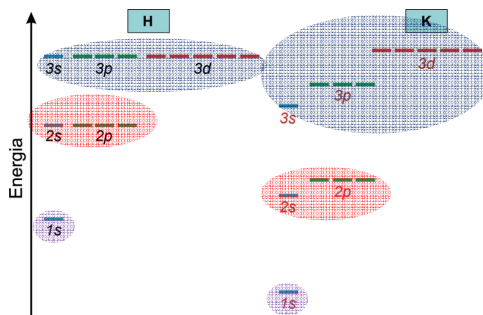
**MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici**

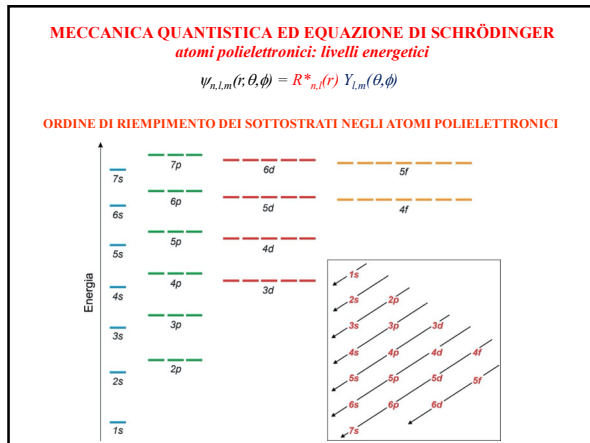
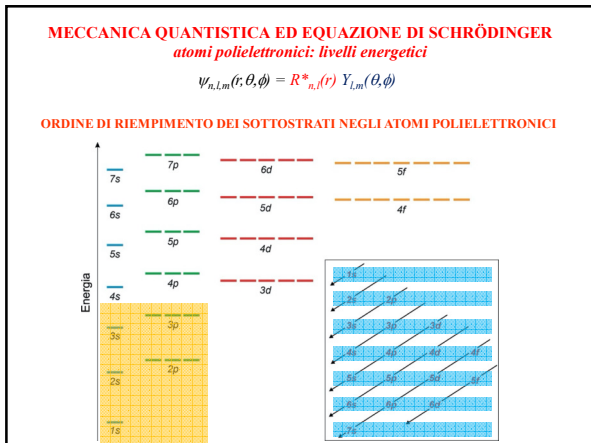
$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}^*(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

- 1) Pertanto, gli orbitali degli atomi polielettronici hanno la *stessa forma ed orientamento spaziale degli orbitali idrogenoidi* e possono quindi essere ancora classificati come orbitali di tipo *s, p, d, f*, etc
- 2) Tuttavia, a differenza degli atomi idrogenoidi, le parti *radiali* $R_{n,l}^*(r)$, sono diverse: **le dimensioni, la struttura interna e l'energia** degli orbitali degli atomi polielettronici dipendono, infatti, non solo dal numero quantico *n*, come negli atomi idrogenoidi, ma anche dal *numero quantico l*
- 3) Di conseguenza, in un atomo polielettronico, i sottostrati (*l*) di uno stesso livello (*n*) hanno energie diverse (*non sono degeneri*)
- 4) In generale, in uno stesso livello *n*: a) l'energia dei sottostrati aumenta all'aumentare del numero quantico *l*; b) tutti i $2l + 1$ orbitali di un sottostrato con un dato valore di *l* restano invece degeneri (hanno quindi la stessa energia i tre orbitali *p*, i cinque orbitali *d* ed i sette orbitali *f* di uno stesso strato *n*)

**MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici: livelli energetici – confronto fra idrogeno e potassio**

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}^*(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$





MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici: configurazione elettronica

- Per determinare la *struttura elettronica* di un atomo polielettronico si deve assegnare ogni elettrone ad uno degli orbitali atomici
- Lo stato (stazionario) di ciascun elettrone in un atomo è completamente determinato da quattro numeri quantici, tre dei quali (n, l, m) individuano l'orbitale ed il quarto la componente intrinseca di spin (s) dell'elettrone
- Wolfgang Pauli (1925) *principio di esclusione*: in un atomo non possono esistere elettroni descritti dagli stessi quattro numeri quantici n, l, m e s
- Di conseguenza, ciascun orbitale (n, l, m) può essere occupato al massimo da due elettroni, aventi spin opposto

Ad esempio, l'orbitale di più bassa energia, $1s$, può essere occupato al massimo da due elettroni descritti, rispettivamente, dai numeri quantici

$n = 1, l = 0, m = 0, s = +1/2$ $n = 1, l = 0, m = 0, s = -1/2$

Un terzo eventuale elettrone dovrà quindi necessariamente occupare un orbitale *più alto in energia*, quale il $2s$ o successivi

La distribuzione degli elettroni fra i vari orbitali disponibili è detta *configurazione elettronica*

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici: configurazione elettronica

La configurazione elettronica degli atomi viene descritta ordinando per energia i sottostrati occupati ed indicando ad apice il numero di elettroni presenti (1 o 2)

Ad esempio, per il litio ($Z = 3$) neutro e allo *stato fondamentale* : $1s^2 2s^1$

mentre un possibile *stato elettronicamente eccitato* del litio neutro è: $1s^2 2s^1 2p^1$

NUMERO MASSIMO DI ELETTRONI PER I VARI TIPI DI SOTTOSTRATI ATOMICI

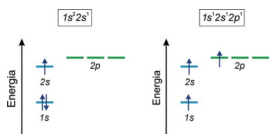
| Sottostrato | Valore di l | Numero di orbitali ($2l+1$) | Numero massimo di elettroni $2(2l+1)$ |
|-------------|---------------|-------------------------------|---------------------------------------|
| s | 0 | 1 | 2 |
| p | 1 | 3 | 6 |
| d | 2 | 5 | 10 |
| f | 3 | 7 | 14 |

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici: configurazione elettronica (diagramma orbitale)

Gli orbitali sono rappresentati come linee orizzontali, quadratini o cerchietti e gli elettroni come frecce dirette verso l'alto ($s = +1/2$) o verso il basso ($s = -1/2$)

Gli orbitali possono essere inoltre disposti in una scala verticale di energia crescente dal basso verso l'alto, oppure in orizzontale, in ordine di energia crescente da sinistra verso destra

DIAGRAMMI ORBITALICI PER LE CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEL LITIO VISTE NELLA PRECEDENTE DIAPOSITIVA

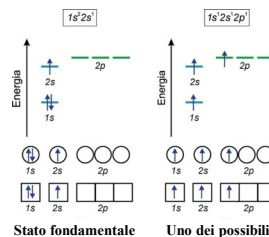


MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici: configurazione elettronica (diagramma orbitale)

Gli orbitali sono rappresentati come linee orizzontali, quadratini o cerchietti e gli elettroni come frecce dirette verso l'alto ($s = +1/2$) o verso il basso ($s = -1/2$)

Gli orbitali possono essere inoltre disposti in una scala verticale di energia crescente dal basso verso l'alto o in orizzontale, in ordine di energia crescente da sinistra verso destra

DIAGRAMMI ORBITALICI PER LE CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEL LITIO VISTE NELLA PRECEDENTE DIAPOSITIVA

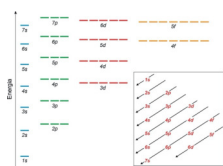


Stato fondamentale **Uno dei possibili stati eccitati**

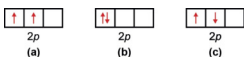
MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER
atomi polielettronici: configurazione elettronica (Le regole di Aufbau)

Configurazione elettronica dello stato fondamentale degli atomi: regole di Aufbau (costruire in tedesco)

- 1) gli elettroni vengono assegnati ai vari sottostrati in ordine di energia degli orbitali crescente, partendo dall'orbitale 1s
- 2) ciascun orbitale può ospitare al massimo due elettroni aventi spin opposto o antiparallelo (principio di esclusione di Pauli)
- 3) dovendo occupare orbitali degeneri di un certo sottostrato, essi vengono riempiti così da avere il maggior numero possibile di elettroni con spin parallelo (regola di Hund)



Ad esempio, per due elettroni da collocare sui tre orbitali 2p, la configurazione energeticamente favorita è la (a)



Configurazione elettronica e diagrammi orbitali degli elementi del primo ($n = 1$) e secondo periodo ($n = 2$)

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitale | | | | | |
|-------|------------------|---|--------------------|----|-----------------|-----------------|-----------------|---------------|
| | | | 1s | 2s | 2p _x | 2p _y | 2p _z | |
| H | 1 | 1s ¹ | ↑ | | | | | |
| He | 2 | 1s ² | ↑↓ | | | | | Guscio chiuso |
| Li | 3 | 1s ² 2s ¹ | ↑↓ | ↑ | | | | |
| Be | 4 | 1s ² 2s ² | ↑↓ | ↑↓ | | | | |
| B | 5 | 1s ² 2s ² 2p ¹ | ↑↓ | ↑↓ | ↑ | | | |
| 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 | ↑↓ | ↑↓ | ↑↓ | ↓↑ | ↓↑ | Guscio chiuso |

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

**PASSIAMO DAL Ne al Na
(DAL SECONDO AL TERZO PERIODO)**

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del terzo periodo ($n = 3$)

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|----------------------------|---|
| | | Core | 3s, 3p _x , 3p _y , 3p _z |
| Na | 11 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ | [Ne] ↑ |
| Mg | 12 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ | [Ne] ↓↑ |
| Al | 13 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ | [Ne] ↓↑ ↑ |
| Si | 14 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ | [Ne] ↓↑ ↑ ↑ |
| P | 15 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ | [Ne] ↓↑ ↑ ↑ ↑ |
| S | 16 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ | [Ne] ↓↑ ↓↑ ↑ ↑ |
| Cl | 17 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ | [Ne] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ |
| Ar | 18 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ | [Ne] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ |

Ar guscio chiuso

N.B. Gli elettroni di core (elettroni interni), molto più bassi in energia rispetto a quelli esterni (elettroni di valenza), di norma non partecipano alla reattività chimica dell'atomo

Ne guscio chiuso

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quarto periodo ($n = 4$)

N.B. Il livello $n = 3$ include anche il sottostrato $3d$ contenente 5 orbitali degeneri, i quali sono però meno stabili del sottostrato $4s$, che quindi viene riempito prima del $3d$, producendo così la configurazione elettronica $[Ar]4s^1$ del potassio K ($Z = 19$), quindi la $[Ar]4s^2$ del calcio Ca ($Z = 20$) e solo allora cominceremo a popolare di elettroni gli orbitali $3d$ (Sc, Ti, V, etc)

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|----------------------------|--|
| | | core | 3d _{x²-y²} , 3d _{xy} , 3d _{z²} , 3d _{xz} , 3d _{yz} , 4s, 4p _x , 4p _y , 4p _z |
| Mg | 12 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ | [Ne] ↓↑ |
| Al | 13 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ | [Ne] ↓↑ ↑ |
| Si | 14 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ | [Ne] ↓↑ ↑ ↑ |
| P | 15 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ | [Ne] ↓↑ ↑ ↑ ↑ |
| S | 16 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ | [Ne] ↓↑ ↓↑ ↑ ↑ |
| Cl | 17 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ | [Ne] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ |
| Ar | 18 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ | [Ne] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ |

Ar guscio chiuso

N.B. Gli elettroni di core (elettroni interni), molto più bassi in energia rispetto a quelli esterni (elettroni di valenza), di norma non partecipano alla reattività chimica dell'atomo

Ne guscio chiuso

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quarto periodo ($n = 4$)

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|----------------------------|--|
| | | core | 3d _{x²-y²} , 3d _{xy} , 3d _{z²} , 3d _{xz} , 3d _{yz} , 4s, 4p _x , 4p _y , 4p _z |
| K | 19 | $[Ar]4s^1$ | [Ar] ↑ |
| Ca | 20 | $[Ar]4s^2$ | [Ar] ↓↑ |
| Sc | 21 | $[Ar]3d^1 4s^2$ | [Ar] ↑ ↓↑ |
| Ti | 22 | $[Ar]3d^2 4s^2$ | [Ar] ↑ ↑ ↓↑ |
| V | 23 | $[Ar]3d^3 4s^2$ | [Ar] ↑ ↑ ↑ ↓↑ |
| Cr | 24 | $[Ar]3d^5 4s^1$ | [Ar] ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↓↑ |
| Mn | 25 | $[Ar]3d^5 4s^2$ | [Ar] ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↓↑ |
| Fe | 26 | $[Ar]3d^6 4s^2$ | [Ar] ↓↑ ↑ ↑ ↑ ↓↑ |
| Co | 27 | $[Ar]3d^7 4s^2$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↑ ↑ ↓↑ |
| Ni | 28 | $[Ar]3d^8 4s^2$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ ↓↑ |
| Cu | 29 | $[Ar]3d^{10} 4s^1$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ |
| Zn | 30 | $[Ar]3d^{10} 4s^2$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ |
| Ga | 31 | $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^1$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ |
| Ge | 32 | $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ ↑ |
| As | 33 | $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^3$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ ↑ ↑ |
| Se | 34 | $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^4$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ ↑ ↓ |
| Br | 35 | $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^5$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↑ ↓ ↑ |
| Kr | 36 | $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^6$ | [Ar] ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ ↓↑ |

Ar guscio chiuso

Elementi (metalli) di transizione (I serie)

N.B. Gli elettroni di core (elettroni interni), molto più bassi in energia rispetto a quelli esterni (elettroni di valenza), di norma non partecipano alla reattività chimica dell'atomo

Ne guscio chiuso

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quarto periodo (n = 4)

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|--|---|
| | | core | 3d ₅ 3d ₄ 3d ₃ 3d ₂ ⁻² 3d ₁ ² 4s 4p ₁ 4p ₂ 4p ₃ |
| K | 19 | [Ar]4s ¹ | [Ar] |
| Ca | 20 | [Ar]3d ¹ 4s ² | [Ar] |
| Sc | 21 | [Ar]3d ¹ 4s ² | [Ar] |
| Ti | 22 | [Ar]3d ² 4s ² | [Ar] |
| V | 23 | [Ar]3d ³ 4s ² | [Ar] |
| Cr | 24 | [Ar]3d ⁵ 4s ¹ | [Ar] |
| Mn | 25 | [Ar]3d ⁵ 4s ² | [Ar] |
| Fe | 26 | [Ar]3d ⁶ 4s ² | [Ar] |
| Co | 27 | [Ar]3d ⁷ 4s ² | [Ar] |
| Ni | 28 | [Ar]3d ⁸ 4s ² | [Ar] |
| Cu | 29 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ | [Ar] |
| Zn | 30 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² | [Ar] |
| Ga | 31 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ | [Ar] |
| Ge | 32 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² | [Ar] |
| As | 33 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ | [Ar] |
| Se | 34 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ | [Ar] |
| Br | 35 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ | [Ar] |
| Kr | 36 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ | [Ar] |

Per gli elementi dal Ga al Kr gli orbitali 3d (pieni) vengono notevolmente stabilizzati fino a trovarsi molto più bassi in energia rispetto agli orbitali 4s e 4p, cioè diventano elettroni di core per questi elementi, le cui proprietà chimiche sono determinate dagli elettroni (di valenza) 4s e 4p

Elementi (metalli) di transizione (I serie)

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quarto periodo (n = 4)

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|--|---|
| | | core | 3d ₅ 3d ₄ 3d ₃ 3d ₂ ⁻² 3d ₁ ² 4s 4p ₁ 4p ₂ 4p ₃ |
| K | 19 | [Ar]4s ¹ | [Ar] |
| Ca | 20 | [Ar]4s ² | [Ar] |
| Sc | 21 | [Ar]3d ¹ 4s ² | [Ar] |
| Ti | 22 | [Ar]3d ² 4s ² | [Ar] |
| V | 23 | [Ar]3d ³ 4s ² | [Ar] |
| Cr | 24 | [Ar]3d ⁵ 4s ¹ | [Ar] |
| Mn | 25 | [Ar]3d ⁵ 4s ² | [Ar] |
| Fe | 26 | [Ar]3d ⁶ 4s ² | [Ar] |
| Co | 27 | [Ar]3d ⁷ 4s ² | [Ar] |
| Ni | 28 | [Ar]3d ⁸ 4s ² | [Ar] |
| Cu | 29 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ | [Ar] |
| Zn | 30 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² | [Ar] |
| Ga | 31 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ | [Ar] |
| Ge | 32 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² | [Ar] |
| As | 33 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ | [Ar] |
| Se | 34 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ | [Ar] |
| Br | 35 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ | [Ar] |
| Kr | 36 | [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ | [Ar] |

Kr guscio chiuso

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quinto periodo (n = 5): riempimento orbitali 5s, 4d, 5p

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|--|---|
| | | core | 4d ₅ 4d ₄ 4d ₃ 4d ₂ ⁻² 4d ₁ ² 5s 5p ₁ 5p ₂ 5p ₃ |
| Rb | 37 | [Kr]5s ¹ | [Kr] |
| Sr | 38 | [Kr]5s ² | [Kr] |
| Y | 39 | [Kr]4d ¹ 5s ² | [Kr] |
| Zr | 40 | [Kr]4d ² 5s ² | [Kr] |
| Nb | 41 | [Kr]4d ⁴ 5s ¹ | [Kr] |
| Mo | 42 | [Kr]4d ⁵ 5s ¹ | [Kr] |
| Tc | 43 | [Kr]4d ⁵ 5s ² | [Kr] |
| Ru | 44 | [Kr]4d ⁷ 5s ¹ | [Kr] |
| Rh | 45 | [Kr]4d ⁸ 5s ¹ | [Kr] |
| Pd | 46 | [Kr]4d ¹⁰ | [Kr] |
| Ag | 47 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ¹ | [Kr] |
| Cd | 48 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² | [Kr] |
| In | 49 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹ | [Kr] |
| Sn | 50 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ² | [Kr] |
| Sb | 51 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³ | [Kr] |
| Te | 52 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴ | [Kr] |
| I | 53 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵ | [Kr] |
| Xe | 54 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶ | [Kr] |

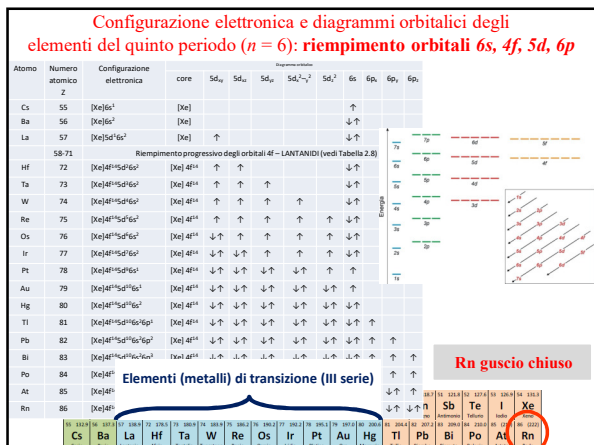
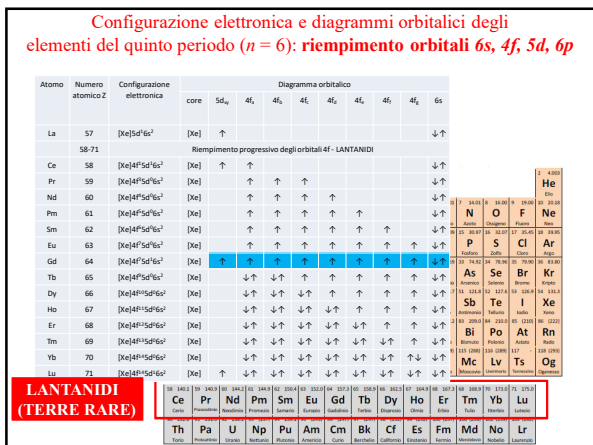
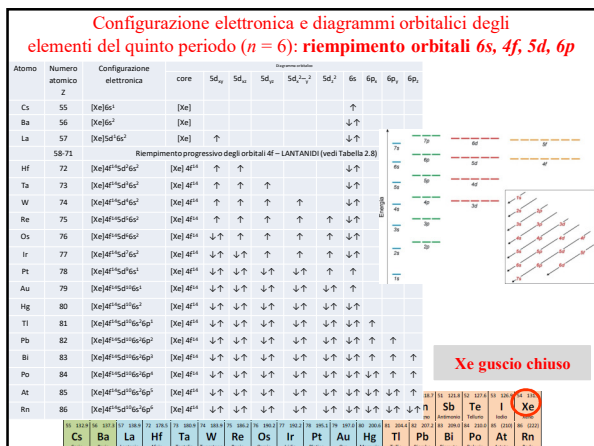
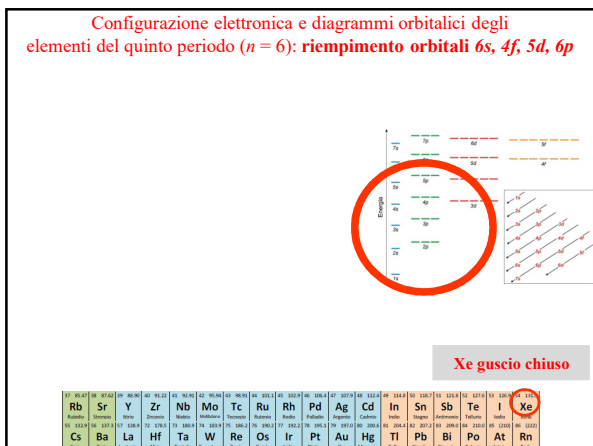
Per gli elementi dal In allo Xe gli orbitali 4d (pieni) vengono notevolmente stabilizzati fino a trovarsi molto più bassi in energia rispetto agli orbitali 5s e 5p, cioè diventano elettroni di core per questi elementi, le cui proprietà chimiche sono determinate dagli elettroni (di valenza) 5s e 5p

Elementi (metalli) di transizione (II serie)

Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quinto periodo (n = 5): riempimento orbitali 5s, 4d, 5p

| Atomo | Numero atomico Z | Configurazione elettronica | Diagramma orbitalico |
|-------|------------------|--|---|
| | | core | 4d ₅ 4d ₄ 4d ₃ 4d ₂ ⁻² 4d ₁ ² 5s 5p ₁ 5p ₂ 5p ₃ |
| Rb | 37 | [Kr]5s ¹ | [Kr] |
| Sr | 38 | [Kr]5s ² | [Kr] |
| Y | 39 | [Kr]4d ¹ 5s ² | [Kr] |
| Zr | 40 | [Kr]4d ² 5s ² | [Kr] |
| Nb | 41 | [Kr]4d ⁴ 5s ¹ | [Kr] |
| Mo | 42 | [Kr]4d ⁵ 5s ¹ | [Kr] |
| Tc | 43 | [Kr]4d ⁵ 5s ² | [Kr] |
| Ru | 44 | [Kr]4d ⁷ 5s ¹ | [Kr] |
| Rh | 45 | [Kr]4d ⁸ 5s ¹ | [Kr] |
| Pd | 46 | [Kr]4d ¹⁰ | [Kr] |
| Ag | 47 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ¹ | [Kr] |
| Cd | 48 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² | [Kr] |
| In | 49 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹ | [Kr] |
| Sn | 50 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ² | [Kr] |
| Sb | 51 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³ | [Kr] |
| Te | 52 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴ | [Kr] |
| I | 53 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵ | [Kr] |
| Xe | 54 | [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶ | [Kr] |

Elementi (metalli) di transizione (II serie)



Configurazione elettronica e diagrammi orbitalici degli elementi del quinto periodo ($n = 7$): riempimento orbitali $7s$, $5f$, $6d$, $7p$

The diagram shows the periodic table with electron configurations for elements from period 5 to 7. A red box highlights the actinide series (elements 89-103) with the label "ATTINIDI".

TAVOLA PERIODICA Dmitrij Mendeleev (circa 1870)

18 colonne (gruppi): simili proprietà atomiche
7 righe (periodi): variazioni simili delle proprietà atomiche

Riflettono la similitudine delle configurazioni elettroniche esterne nei vari gruppi

TAVOLA PERIODICA sottolivelli esterni (di valenza)

Legend:

- elementi blocco s (red)
- elementi blocco p (green)
- elementi blocco d (orange)
- elementi blocco f: lantanidi (4f) (light blue)
- elementi blocco f: attinidi (5f) (grey)

Gli elementi dei blocchi s e p sono anche detti *elementi dei gruppi principali* (1, 2 e 13-18)

TAVOLA PERIODICA

Gruppo 1 (metalli alcalini): configurazione elettronica esterna ns^1 . Perdono facilmente l'elettrone esterno. Sono metalli teneri e molto reattivi, che formano esclusivamente composti ionici in cui compaiono come monocationi M^+ (N.B. no H).

Gruppo 2 (metalli alcalino-terrosi): configurazione elettronica esterna ns^2 . Sono metalli relativamente teneri e reattivi, che formano quasi esclusivamente composti ionici in cui compaiono come dicationi M^{2+} .

Gruppo 18 (gas nobili): configurazione elettronica esterna ns^2np^6 (per l'elio $1s^2$) con energia molto minore di $(n+1)s$, quindi molto poco reattivi.

Gruppi dal 3 al 12 (metalli di transizione): configurazioni da $ns^2(n-1)d^1$ a $ns^2(n-1)d^{10}$ ed essendo $n = 4-7$. Simili proprietà fra loro.

MECCANICA QUANTISTICA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

UN
MODELLO
È UN
MODELLO

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

1) Dimensioni atomiche: sono ricavate misurando la distanza (r) fra i nuclei di due atomi adiacenti in un campione dell'elemento (*raggio covalente*).

I metalli del gruppo 1 mostrano i valori più alti mentre i gas nobili presentano i valori più bassi

L'aumento di Z_{eff} lungo un periodo giustifica la parallela diminuzione delle dimensioni degli atomi

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

1) Dimensioni atomiche: sono ricavate misurando la distanza (r) fra i nuclei di due atomi adiacenti in un campione dell'elemento (raggio covalente).

| | | | | | | |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 1 | 2 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 |
| Li 152 | Be 111 | B 88 | C 77 | N 72 | O 66 | F 64 |
| Na 186 | Mg 160 | Al 143 | Si 117 | P 110 | S 104 | Cl 99 |
| K 231 | Ca 197 | Ga 126 | Ge 122 | As 121 | Se 116 | Br 115 |
| Rb 244 | Sr 215 | In 162 | Sn 145 | Sb 141 | Te 137 | I 133 |
| Cs 262 | Ba 217 | Tl 171 | Pb 154 | Bi 146 | Po 142 | At 140 |

Due andamenti generali:

- lungo ciascun gruppo, il raggio atomico aumenta con il numero del periodo (n)
- lungo ciascun periodo, il raggio atomico diminuisce all'aumentare del numero atomico (Z_{eff})

Invece nelle serie di transizione il raggio atomico varia molto meno (si riempiono gli orbitali d che sono «quasi di core» (Z_{eff} quasi costante nella serie)

I metalli del gruppo 1 mostrano i valori più alti mentre i gas nobili presentano i valori più elevati

Raggi atomici (pm) degli elementi dei gruppi principali riportati come cerchi in scala (metalli in azzurro, non metalli in rosso, semimetalli in viola)

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

2) Energia di ionizzazione: è l'energia minima per rimuovere l'elettrone più esterno da un atomo neutro in fase gassosa e formare uno ione positivo secondo il processo: $A_{(g)} \rightarrow A^+_{(g)} + e^-$ (N.B. è espressa in $J \text{ mol}^{-1}$)

Lungo un gruppo, l'energia di ionizzazione generalmente diminuisce all'aumentare del numero atomico (aumenta n) e la distanza dell'elettrone ns^1 dal nucleo (è meno trattenuto)

Andando da sinistra a destra lungo un periodo non cambia n , il numero quantico principale dell'orbitale occupato più esterno non cambia; tuttavia aumenta Z_{eff} di cui risente l'elettrone più esterno (è più trattenuto)

I metalli del gruppo 1 mostrano i valori minori mentre i gas nobili presentano i valori più elevati

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

2) Affinità elettronica: è la variazione di energia (positiva o negativa) che accompagna il processo in cui un atomo neutro in fase gassosa acquista un elettrone, collocandolo nell'orbitale disponibile più stabile, per formare uno ione negativo:

$$A_{(g)} + e^- \rightarrow A_{(g)}^- \quad (\text{N.B. è espressa in } J \text{ mol}^{-1})$$

La maggior parte degli atomi ha affinità elettronica negativa (libera energia) -10^1 - 10^2 kJ mol⁻¹ (gli alogeni, gruppo 17, liberano più energia, seguiti dagli elementi del gruppo 16)

Valori positivi risultano $\approx 10^1$ kJ mol⁻¹ (gas nobili e metalli alcalino-terrosi)

L'affinità elettronica non varia di molto nel gruppo, mentre diventa via via più negativa lungo il periodo con *anomalie* nei passaggi del 2° e 15° gruppo (rispettivamente sottostrato ns^2 completo e sottostrato np^3 semicompleto)

METALLI, NON METALLI E SEMIMETALLI

I **metalli** sono solidi duttili e malleabili, dalla caratteristica lucentezza e presentano una elevata conducibilità termica ed elettrica. Tendono a perdere elettroni (formano *cationi*).

I **non metalli** sono invece per lo più solidi friabili o gas e non conducono elettricità e calore. Tendono ad acquisire elettroni (formano *anioni*).

I **semimetalli** presentano caratteristiche intermedie.

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|----|---------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-------------|----|-------------|----|----|----|----|
| H | | | | | | | | | | | | | | | | | He | |
| Li | Be | METALLI | | | | | | | | | | SEMIMETALLI | | NON METALLI | | | | 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 | Rn | |
| Fr | Ra | Ac | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | |
| | | 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 | La | | | |

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

L'atomo neutro di un qualsiasi elemento E si trova nello *stato di ossidazione zero*.

Togliendo o aggiungendo uno o più elettroni all'atomo neutro, questo diventa una *ione*.

Togliendo 1, 2, 3... elettroni si ottengono i *cationi* E⁺, E²⁺, E³⁺..., per i quali lo *stato di ossidazione* è +1, +2, +3....

Se invece aggiungiamo 1, 2, 3... elettroni si ottengono gli *anioni* E⁻, E²⁻, E³⁻..., per i quali lo *stato di ossidazione* è -1, -2, -3....

Quindi, per le specie monoatomiche lo stato di ossidazione coincide con la loro carica.

Gli ioni più stabili sono quelli che presentano una configurazione elettronica a guscio chiuso.

Cationi

Metalli del blocco s (gruppi 1 e 2): hanno configurazione elettronica esterna ns^1 e ns^2 . Perdono facilmente 1 e 2 elettroni di valenza, rispettivamente, *raggiungendo così la configurazione elettronica a guscio chiuso del gas nobile che li precede* (la carica del catione coincide con il numero del gruppo):

$$Na([Ne]3s^1) \rightarrow Na^+([Ne]) + e^- \quad Mg([Ne]3s^2) \rightarrow Mg^{2+}([Ne]) + 2e^-$$

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

Cationi

Elementi metallici dei gruppi del blocco p (in basso dal gruppo 13 al 15).

Tutti i metalli del gruppo 13 possono perdere i tre elettroni di valenza. Ad esempio per Al:

$$Al([Ne]3s^2 3p^1) \rightarrow Al^{3+}([Ne]) + 3e^-$$

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 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 | Rn | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Fr | Ra | Ac | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <table border="1" style="width: 100%; text-align: center; border-collapse: collapse;"> <tr> <td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>La</td> </tr> </table> | | | | | | | | | | | | | | | | | | 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 | La |
| 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 | La | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

Cationi

Elementi metallici dei gruppi del blocco p (in basso dal gruppo 13 al 15)

Se i metalli Sn e Pb (gruppo 14) oppure Sb e Bi (gruppo 15) perdessero tutti gli elettroni di valenza genererebbero cationi con carica molto elevata (instabili):

$$\text{Sn}([\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^2) \rightarrow \text{Sn}^{4+}([\text{Kr}]4d^{10}) + 4e^- \quad \text{Sb}([\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^3) \rightarrow \text{Sb}^{5+}([\text{Kr}]4d^{10}) + 5e^-$$

Quindi questi elementi tendono piuttosto a *condividere* gli elettroni di valenza con gli atomi con cui si legano (*legami covalenti polari*).

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 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 | Rn | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Fr | Ra | Ac | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <table border="1" style="width: 100%; text-align: center; border-collapse: collapse;"> <tr> <td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>La</td> </tr> </table> | | | | | | | | | | | | | | | | | | 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 | La |
| 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 | La | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

Cationi

Elementi metallici dei gruppi del blocco p (in basso dal gruppo 13 al 15)

Dal *quinto periodo* in poi, gli elementi metallici dei gruppi dal 13 al 15 *possono* inoltre limitarsi a *perdere* i soli elettroni negli orbitali *np*, mantenendo così due elettroni nell'orbitale *ns*. Ad esempio, per gli elementi del quinto periodo si ha:

$$\text{In}([\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^1) \rightarrow \text{In}^+([\text{Kr}]4d^{10}5s^2) + e^- \quad \text{Sn}([\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^2) \rightarrow \text{Sn}^{2+}([\text{Kr}]4d^{10}5s^2) + 2e^-$$

$$\text{Sb}([\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^3) \rightarrow \text{Sb}^{3+}([\text{Kr}]4d^{10}5s^2) + 3e^-$$

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 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 | Rn | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Fr | Ra | Ac | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <table border="1" style="width: 100%; text-align: center; border-collapse: collapse;"> <tr> <td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>La</td> </tr> </table> | | | | | | | | | | | | | | | | | | 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 | La |
| 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 | La | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

Anioni

Elementi dei gruppi 17 e 16

Sono tutti non metalli, *acquistano* 1 e 2 elettroni, rispettivamente, per dare i corrispondenti anioni di carica -1 e -2, che sono particolarmente stabili, in quanto possiedono la configurazione elettronica del gas nobile che li segue:

$$\text{Cl}([\text{Ne}]3s^23p^5) + e^- \rightarrow \text{Cl}^-([\text{Ne}]3s^23p^6) \quad \text{S}([\text{Ne}]3s^23p^4) + 2e^- \rightarrow \text{S}^{2-}([\text{Ne}]3s^23p^6)$$

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 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 | Rn | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Fr | Ra | Ac | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <table border="1" style="width: 100%; text-align: center; border-collapse: collapse;"> <tr> <td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>La</td> </tr> </table> | | | | | | | | | | | | | | | | | | 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 | La |
| 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 | La | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

Anioni

Elementi dei gruppi 15 e 14

Lo stesso comportamento è più raro per i non metalli dei gruppi 15 e (soprattutto) 14. Di fatto si trova che l'azoto e (in misura minore) il fosforo, possono formare anioni di carica -3:

$$\text{N}([\text{He}]2s^22p^3) + 3e^- \rightarrow \text{N}^{3-}([\text{He}]2s^22p^6) \quad \text{P}([\text{Ne}]3s^23p^3) + 3e^- \rightarrow \text{P}^{3-}([\text{Ne}]3s^23p^6)$$

mentre per il C (gruppo 14) lo stato di ossidazione -4 è stabilizzato solo dai metalli alcalini

$$\text{C}([\text{He}]2s^22p^2) + 4e^- \rightarrow \text{C}^{4-}([\text{He}]2s^22p^6)$$

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

Ioni dei metalli di transizione

I metalli di transizione possono formare cationi M^{n+} perdendo da uno fino a cinque elettroni sia da orbitali di tipo ns (*meno stabili*) che da orbitali di tipo $(n-1)d$ (*più stabili*).

Quindi si perdono prima gli elettroni nell'orbitale ns (formando in genere cationi M^{2+}), che poi possono eventualmente perdere ulteriori elettroni $(n-1)d$ per dare ioni di carica maggiore. Ad esempio, per il ferro:

$$Fe([Ar]3d^64s^2) \rightarrow Fe^{2+}([Ar]3d^6) + 2e^- \quad Fe([Ar]3d^64s^2) \rightarrow Fe^{3+}([Ar]3d^5) + 3e^-$$

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

Ioni dei metalli di transizione

Solo gli elementi del **gruppo 3**, ed in parte dei **gruppi 4 e 5**, perdono tutti gli elettroni nd così da raggiungere la configurazione elettronica del gas nobile che li precede. Ad esempio:

$$Sc([Ar]3d^14s^2) \rightarrow Sc^{3+}([Ar]) + 3e^- \quad Ti([Ar]3d^24s^2) \rightarrow Ti^{4+}([Ar]) + 4e^-$$

$$V([Ar]3d^34s^2) \rightarrow V^{5+}([Ar]) + 5e^-$$

Tuttavia i cationi di **gruppi 4 e 5** con cariche +4 e +5 non sono stabili come tali e tendono a formare composti con legami a carattere **covalente polare**.

STATI DI OSSIDAZIONE E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI IONI

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

Ioni dei metalli di transizione

Gli elementi del **gruppo 11** hanno configurazione elettronica $(n-1)d^{10}ns^1$ e perdono l'unico elettrone nell'orbitale ns per dare ioni M^+ stabili.

Possono anche perdere uno o due ulteriori elettroni dagli orbitali nd per dare ioni M^{2+} e M^{3+} .

Gli elementi del **gruppo 12** hanno configurazione elettronica $(n-1)d^{10}ns^2$ e perdono esclusivamente i due elettroni dell'orbitale ns per dare ioni M^{2+} (la configurazione $(n-1)d^{10}$, con il sottostrato d completo, conferisce a questi cationi una particolare stabilità).

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

4) **Raggi ionici**: le dimensioni degli ioni si ottengono misurando la distanza fra i nuclei di due ioni adiacenti di carica opposta in un cristallo ionico.

N.B. è spesso espressa in Angstrom ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)

Raggi ionici (in pm) degli ioni dei gruppi principali

| | | | | | | |
|--------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|--------|
| 1 | 2 | 13 | 15 | 16 | 17 | |
| Li^+ | Be^{2+} | B^{3+} | N^{3-} | O^{2-} | F^- | |
| 76 | 45 | 23 | 171 | 140 | 133 | |
| 2 | Na^+ | Mg^{2+} | Al^{3+} | P^{3-} | S^{2-} | Cl^- |
| 102 | 72 | 54 | 212 | 184 | 181 | |
| 3 | K^+ | Ca^{2+} | Ga^{3+} | As^{3-} | Se^{2-} | Br^- |
| 138 | 100 | 62 | 222 | 196 | 196 | |
| 4 | Rb^+ | Sr^{2+} | In^{3+} | Sb^{3-} | Te^{2-} | I^- |
| 152 | 118 | 80 | 241 | 220 | 220 | |
| 5 | Cs^+ | Ba^{2+} | Tl^{3+} | Bi | Po | At |
| 167 | 135 | 88 | | | | |

L'andamento periodico dei **raggi ionici** è simile a quello osservato per i **raggi atomici** (per le stesse ragioni)

Il raggio dei cationi (anioni) è sempre minore (maggiore) di quello degli atomi neutri corrispondenti

PROPRIETA' MAGNETICHE

Le proprietà magnetiche di una sostanza riflettono la configurazione elettronica degli elementi di cui questa è costituita, in quanto lo *spin* di ciascun elettrone genera un suo proprio campo magnetico.

- 1) Le sostanze *diamagnetiche* risultano debolmente respinte da un campo magnetico esterno (generano un piccolo momento magnetico diretto in verso opposto al campo applicato). Sono costituite da atomi o molecole che non hanno un momento magnetico proprio.
- 2) Le sostanze *paramagnetiche* e *ferromagnetiche* sono invece costituite da atomi o molecole che presentano un momento magnetico proprio. In presenza di un campo magnetico esterno, i singoli momenti magnetici atomici tendono ad allinearsi lungo la direzione del campo applicato, rinforzandolo (debolmente per le sostanze paramagnetiche, fortemente per quelle ferromagnetiche). Di conseguenza, queste sostanze sono attratte da un campo magnetico applicato.
- 3) Se due elettroni occupano uno stesso orbitale con spin antiparalleli, i loro momenti magnetici si elidono. Quando invece un elettrone occupa singolarmente un orbitale, esso genera un momento magnetico diverso da zero.
- 4) Ne consegue che una sostanza in cui tutti gli elettroni sono accoppiati sarà diamagnetica, mentre una sostanza in cui uno o più elettroni sono spaiati sarà paramagnetica o ferromagnetica.