

Chimica e Propedeutica Biochimica

Beatrice Vallone

Paola Baiocco

Dipartimento di Scienze Biochimiche
Sapienza - Università di Roma

E-mail: beatrice.vallone@uniroma1.it
paola.baiocco@uniroma1.it

STRUTTURA DELLA MATERIA

1. Cosa studia la Chimica
2. Quali sono gli stati della Materia
3. Da cosa è composta la materia
4. Teoria atomica di Dalton
5. Come si definisce numero atomico e massa atomica
6. Struttura atomica dell'atomo
7. Rappresentazione grafica degli orbitali
8. Tavola periodica degli elementi
9. Definizione di energia di ionizzazione ed affinità elettronica

CHIMICA: STUDIO DELLA MATERIA: Struttura
Proprietà
Trasformazioni

STATI DI AGGREGAZIONE DELLA MATERIA: Solido
(Disposizione delle particelle e forze di interazione) Liquido
Gassoso

PROPRIETA' DELLA MATERIA: FISICHE
CHIMICHE

TRASFORMAZIONI DI STATO: trasformazioni FISICHE
CHIMICHE
(Scomparsa o formazione di sostanze)

ENERGIA: Cinetica *(Energia che compie lavoro)*
Potenziale *(Energia conservata)*

L'energia chimica è energia potenziale

MATERIA

ELEMENTO: *sostanza che non può essere suddivisa in altri componenti mediante reazioni chimiche ordinarie.*
(O, C, H, N, Au, Cu, Zn, Fe ...)

COMPOSTO: *sostanza costituita da due o più elementi, combinati tra loro in proporzioni definite e costanti. Un composto presenta proprietà diverse da quelle dei suoi elementi costituenti.*
(H₂O, C₆H₁₂O₆, HCl, NH₃ ...)

MISCELE: *costituite da due o più sostanze combinate in proporzioni non definite. Le proprietà degli elementi costituenti rimangono inalterate.*

MISCELE OMOGENEE:
MISCELE ETEROGENEE:

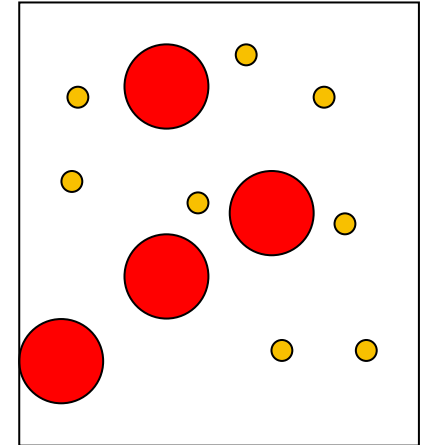
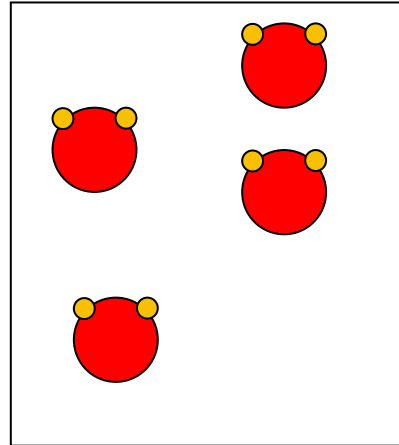
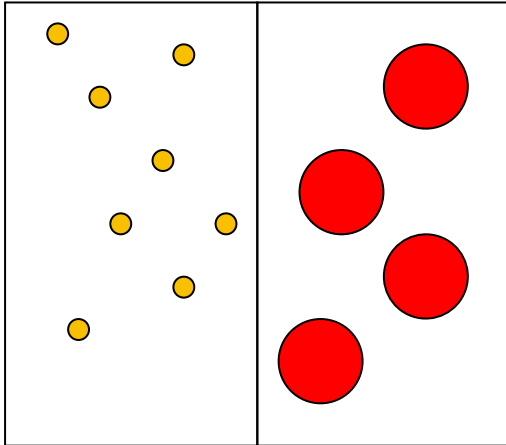
Soluzioni
Miscele di solidi

Atomi
elemento 1

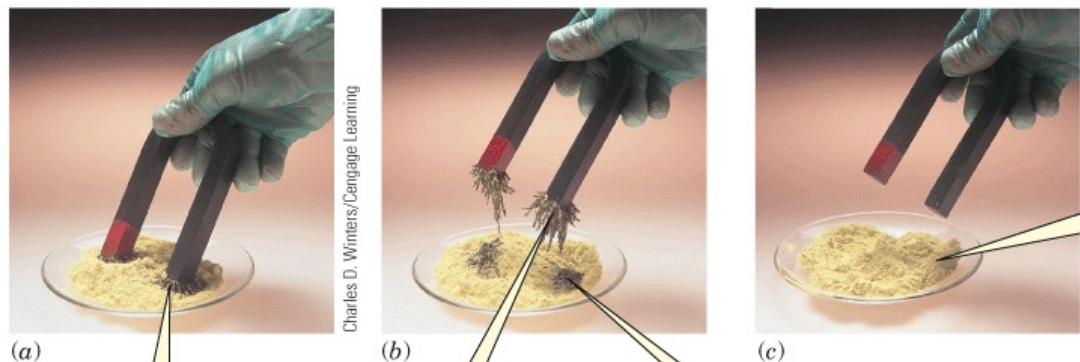
Atomi
elemento 2

Composto degli
elementi 1 e 2

Miscela degli
elementi 1 e 2



Una differenza importante tra composto e miscela è che il composto è costituito da due o più elementi in cui il rapporto tra le masse è fisso e costante.



Charles D. Winters/Cengage Learning

(a) Ferro e zolfo possono essere separati utilizzando un magnete

(b) La prima volta che il magnete viene allontanato dalla miscela, gran parte del ferro viene rimosso con esso

(c) Lo zolfo appare ancora sporco a causa della piccola quantità di ferro rimasto nella miscela

Ripetute estrazioni producono un composto di color giallo brillante (zolfo) che non può essere ulteriormente purificato utilizzando questa metodologia

FIGURA 2.4 Separazione di una miscela di zolfo e ferro. (a) La miscela di zolfo e ferro viene separata utilizzando un magnete. (b) La maggior parte del ferro presente viene rimossa con la prima estrazione. (c) Le estrazioni possono proseguire fino a quando, utilizzando questa metodologia, non si riuscirà più ad estrarre del ferro.



Bettelheim, Brown, Campbell, Farrell
Chimica e propedeutica biochimica
 EdiSES

ELEMENTI PRESENTI NEGLI ORGANISMI

Carbonio (C)
Idrogeno (H)
Azoto (N)
Ossigeno (O)

I più abbondanti in tutti gli organismi

Calcio (Ca)
Cloro (Cl)
Magnesio (Mg)
Fosforo (P)
Potassio (K)
Sodio (Na)
Zolfo (S)

Metalli presenti in piccole quantità ed essenziali per la vita

Cobalto (Co)
Rame (Cu)
Ferro (Fe)
Manganese (Mn)
Zinco (Zn)

Meno abbondanti ma presenti in tutti gli organismi

Alluminio (Al)
Arsenico (Ar)
Boro (B)
Bromo (Br)
Cromo (Cr)
Fluoro (F)
Iodio (I)
Molibdeno (Mo)

Si trovano in alcuni organismi; necessari in tracce

Perché un elemento differisce da un altro?

TEORIA ATOMICA DI DALTON (1808):

- ✓ Ciascun elemento è costituito di particelle dette atomi.
- ✓ Tutti gli atomi di un dato elemento sono identici.
- ✓ Gli atomi di elementi diversi hanno proprietà differenti (ad es. la massa).
- ✓ Le reazioni chimiche non mutano gli atomi di un elemento in quelli di un altro;
(nel corso delle reazioni chimiche gli atomi non si creano e non si distruggono)
- ✓ I composti si originano dalla combinazione di atomi di almeno 2 elementi.
- ✓ In un dato composto il numero relativo e la specie degli atomi sono costanti.

L'atomo è la più piccola parte di un elemento che ne mantiene le caratteristiche

EVIDENZE DELLA TEORIA ATOMICA DI DALTON:

Legge di conservazione della Massa (Lavoiser)

- ✓ Non si osservano variazioni di massa complessiva in una trasformazione chimica (*nel corso delle reazioni chimiche gli atomi non si creano e non si distruggono*)

Legge delle proporzioni definite e costanti (Proust)

- ✓ In un composto, le masse di due o più sostanze si combinano tra di loro secondo rapporti definiti e costanti.

In che cosa gli atomi di elementi diversi differiscono fra loro?

STRUTTURA DELL' ATOMO

ATOMO: unità elementare *INDIVISIBILE* composta da un nucleo centrale intorno al quale sono presenti gli elettroni (Faraday XIX sec.)

- NUCLEO: composto da: protoni dotati di carica positiva (+)
+
neutroni non carichi
- ELETTRONI dotati di carica negativa (-)

La massa di protoni e neutroni è circa uguale, pari a $1,6 \times 10^{-24}g$, quella degli elettroni è 1.800 volte minore.

Il raggio atomico è dell' ordine di 1 \AA (10^{-10} m). Il nucleo ha un raggio di circa 10^{-15} m .

- Se il nucleo avesse raggio=1 cm, il raggio atomico sarebbe pari a 1 km.



Quanto pesa un atomo? **LA MASSA ATOMICA RELATIVA**

Per convenzione si adotta come riferimento la massa di un isotopo stabile e abbondante, il ^{12}C

Unità di Massa Atomica (UMA) = 1/12 della massa dell' isotopo ^{12}C

1 UMA = $1.6605402 \times 10^{-27}$ kg

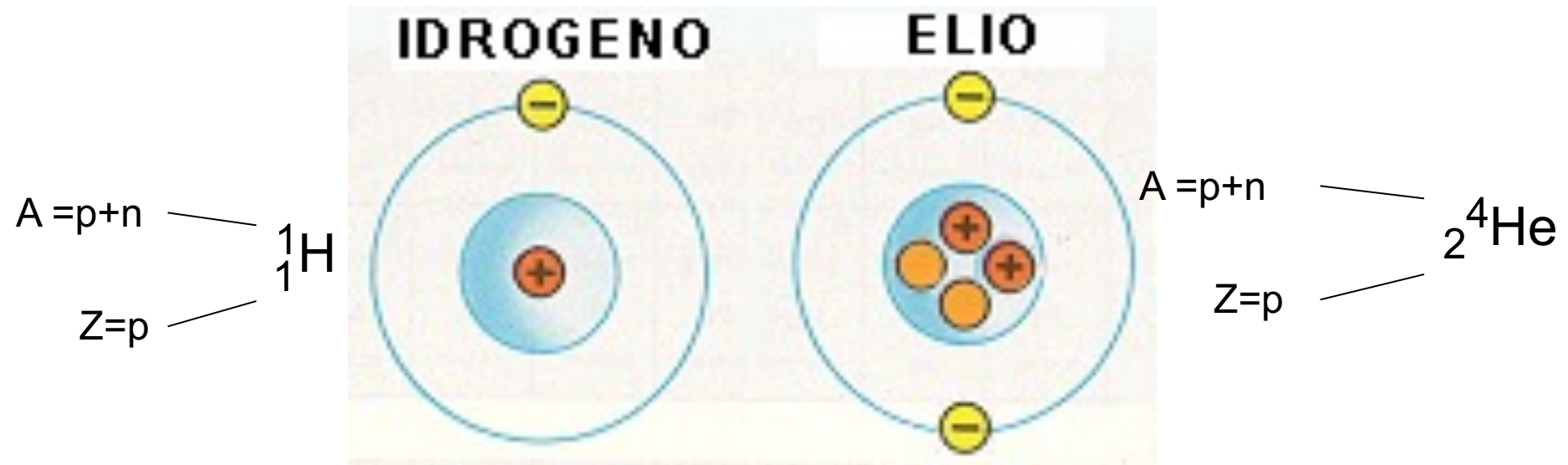
Quanto pesa un composto? **IL PESO MOLECOLARE**

Il P.M. è la somma dei pesi atomici degli elementi costituenti moltiplicato per il coefficiente stechiometrico es.: H_2O .

Gli atomi si differenziano uno dall'altro nel NUMERO di particelle elementari (protoni, neutroni, elettroni) che li compongono. Si distinguono così i diversi ELEMENTI con nomi e simboli propri

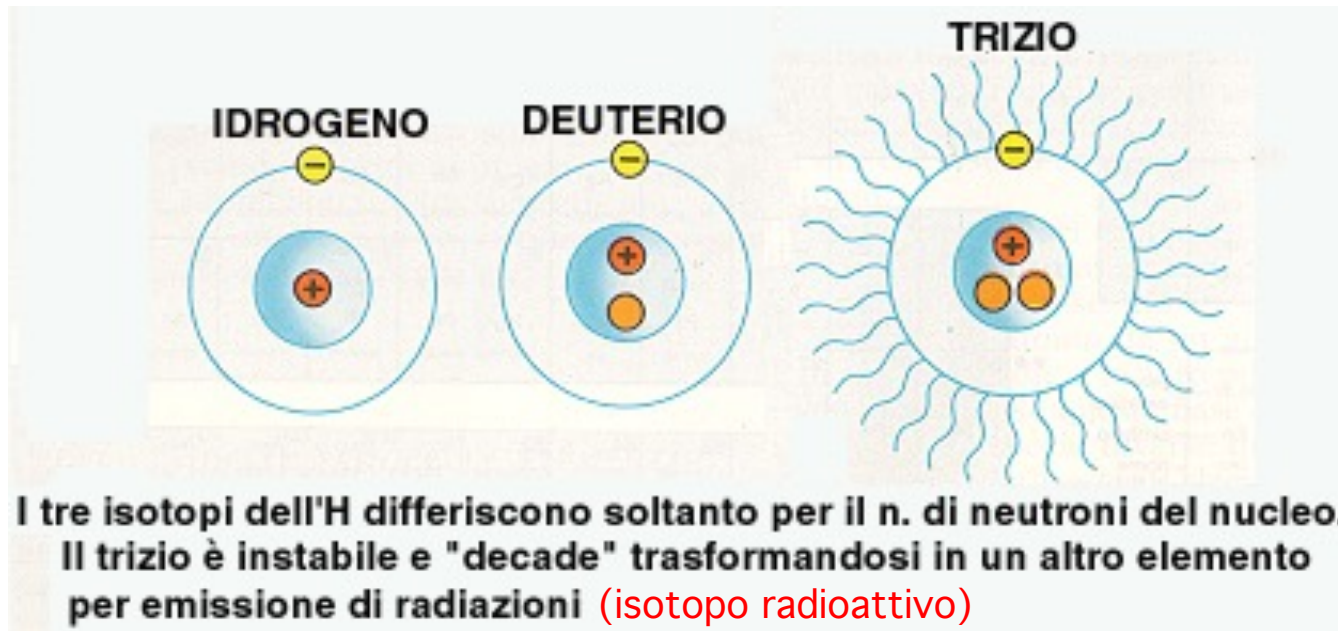
Z = numero atomico = n° di **protoni** contenuti nel nucleo

A = numero di massa = n° **protoni** + n° **neutroni**



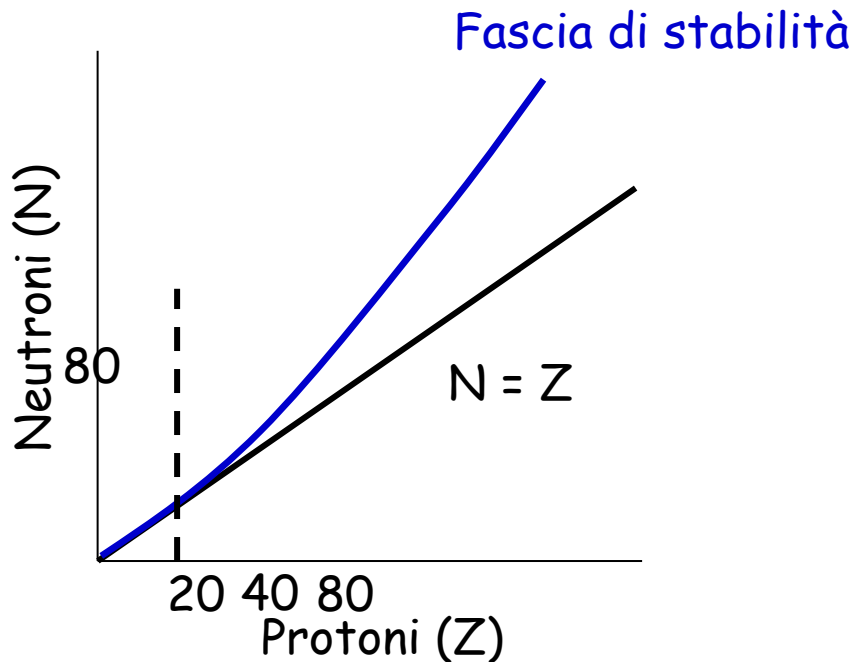
Gli atomi sono elettricamente neutri, contengono cioè lo stesso numero di protoni ed elettroni

ISOTOPI = atomi con numero atomico Z uguale ma con numero di massa (A) diverso



STABILITA' DEI NUCLEI E DECADIMENTO RADIOATTIVO

In natura esistono nuclei atomici stabili, detti freddi, e nuclei instabili, detti caldi. I nuclei caldi decadono spontaneamente emettendo radiazioni corpuscolate e si trasformano in nuclei diversi (cioè con diverso valore di Z) detti nuclei figli.



La composizione del nucleo in termini di protoni e neutroni determina la stabilità dell'elemento: si può generalmente accettare che nuclidi stabili abbiano un rapporto tra N/P circa pari a 1

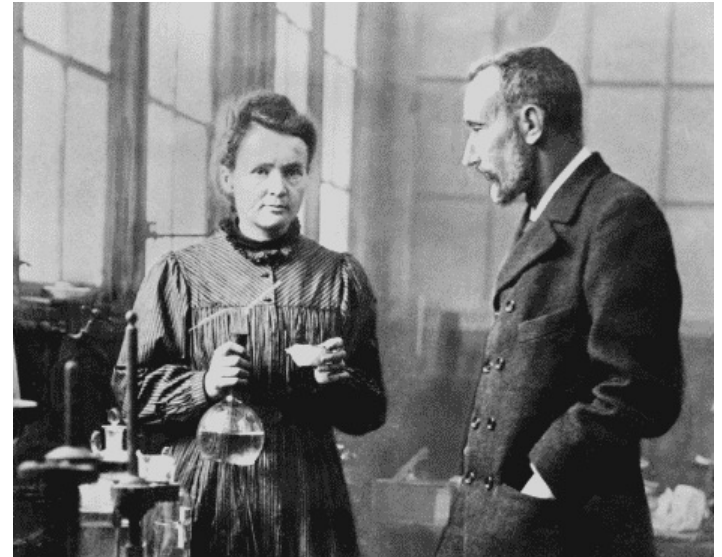
I nuclei con n° di protoni > 84 sono instabili

Radioattività

Le particelle che compongono il nucleo possono andare incontro ad alcune trasformazioni, fenomeno definito come **RADIOATTIVITA'**.

Fu il fisico francese Henri Becquerel (1896) a scoprire che sali di Uranio emettevano radiazioni in grado di produrre immagini fotografiche.

Fu insignito del Nobel nel 1903 insieme a Marie e Pierre Curie per la scoperta della radioattività.



MISURA DELLA RADIOATTIVITA'

Le radiazioni sono rilevate e misurate attraverso **CONTATORI GEIGER-MULLER**

L'unità di misura della radioattività è il **Becquerel (Bq)**, corrispondente ad un evento di decadimento nucleare per secondo. Ogni isotopo radioattivo ha una sua specifica intensità di radioattività.

Unità di misura della radioattività il **Curie (ci)**, definito come la quantità di radiazione emessa in 1 secondo da 1 g di radio (quindi $1 \text{ cu} = 3,7 \times 10^{10} \text{ Bq}$) e tale unità è ancora occasionalmente impiegata nella pratica.

Sostanze radioattive

L'attività di una sorgente radioattiva non si mantiene costante ma bensì decresce progressivamente nel tempo.

Il Periodo di dimezzamento ($T_{1/2}$) o emivita è il tempo necessario affinché l'attività di una sorgente si dimezzi

Esempio: Se 10 mg di ^{131}I sono somministrati ad un paziente, quanto ne rimane nel corpo dopo 32 giorni? Il tempo di dimezzamento è di 8 giorni.

32 giorni corrispondono a 4 emivite. Se si parte da 10 mg, dopo un'emivita rimangono 5 mg, dopo 2 emivite rimangono 2,5 mg, dopo 3 rimangono 1,25 e dopo 4 emivite rimangono 0,625 mg.

Radiazioni Ionizzanti



Si indicano come ionizzanti quelle radiazioni, elettromagnetiche o corpuscolari, che sono dotate di sufficiente energia da poter ionizzare gli atomi del mezzo attraversato.

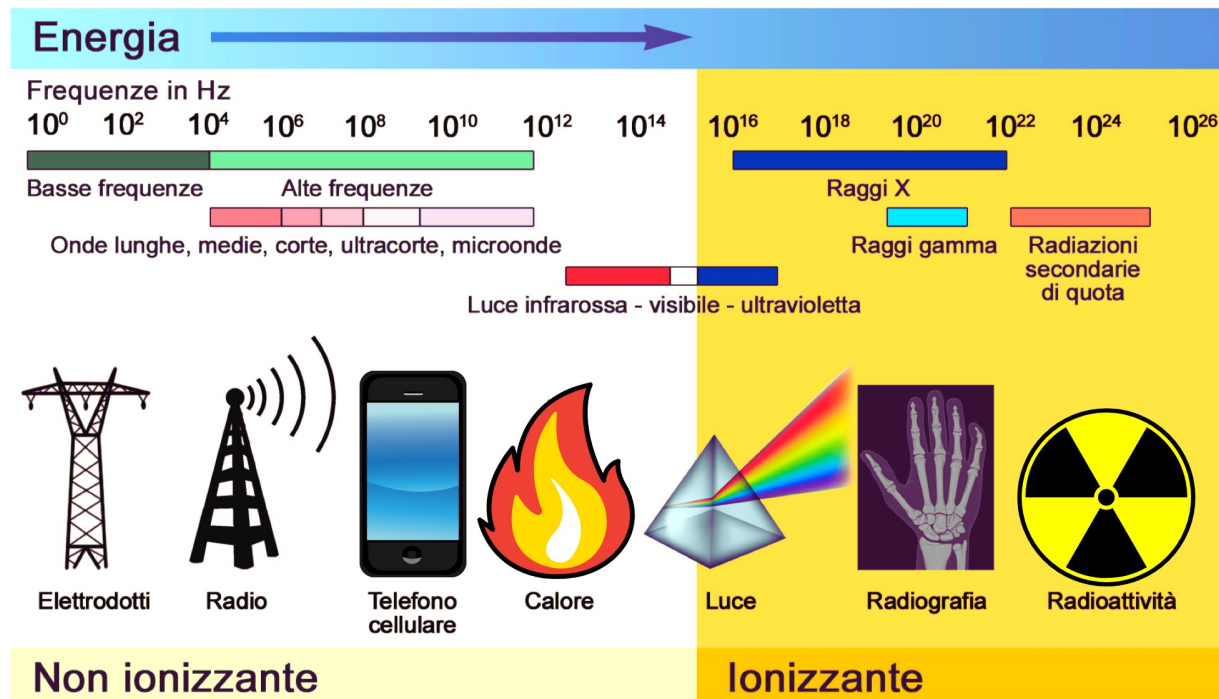
Corpuscolare

- particelle leggere elettricamente cariche (elettroni, positroni)
- particelle pesanti elettricamente cariche (particelle alfa)
- particelle neutre (neutroni)

Elettromagnetica

Raggi X e gamma che si differenziano dalle altre tipologie di radiazioni elettromagnetiche solo per la capacità di produrre ionizzazione

Radiazioni ionizzanti

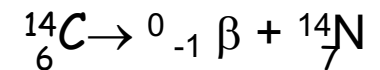
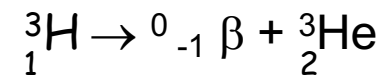
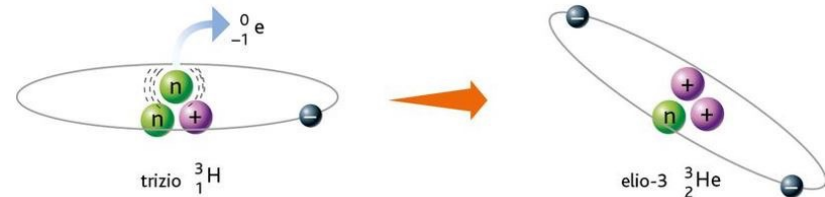


TIPI DI RADIAZIONI IONIZZANTI

Le più importanti reazioni nucleari sono le seguenti:

Radiazione α : emissione dal nucleo di 2 protoni e 2 neutroni. Sono utilizzate per ridurre lesioni primarie di tumori o metastasi. Ridotta capacità di danneggiare i tessuti circostanti.

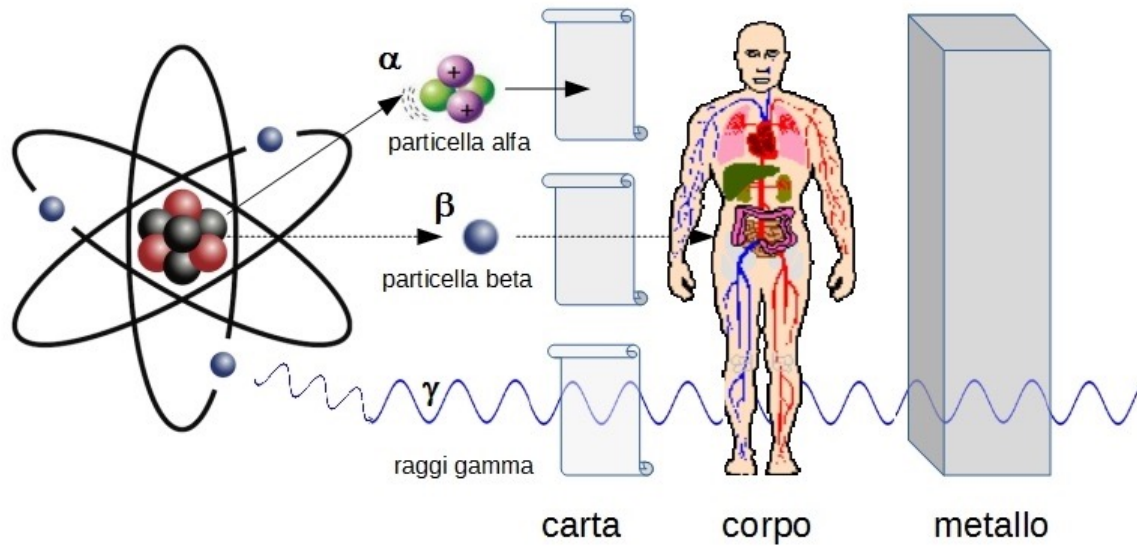
Radiazione β : sono emissioni di particelle con massa simile all'elettrone e naturalmente esistono nelle due varietà β^+ e β^- . Danno luogo a trasmutazione nel senso che in seguito alla radiazione si ottengono atomi diversi. Le emissioni β^+ vengono utilizzate in medicina nella PET



Radiazione γ : emissione di fotoni cioè elettricamente neutri e privi di massa

Capacità di penetrazione

La capacità di penetrazione all'interno della materia dipende dall'energia, dal tipo di radiazione emessa e dalla composizione e dallo spessore del materiale attraversato



Dose Assorbita e Dose Equivalente

La **Dose Assorbita** è definita come l'energia E depositata nell'unità di massa m per effetto delle radiazioni ionizzanti.

$$D = E / m$$

L'unità di misura è il **Gy (Gray)**, che corrisponde ad un Joule/kg.

La **Dose Equivalente** è definita come la dose assorbita D moltiplicata per un fattore di ponderazione della radiazione w_R che tiene conto della sua "efficacia" biologica

$$H_T = w_R D$$

L'unità di misura è il **Sv (Sievert)**

Effetto delle Radiazioni Ionizzanti

Dose ricevuta al corpo intero	Effetti
Fino a 0.25 Gy	Per lo più nessun sintomo soggettivo o oggettivo
0.5 Gy	In alcuni individui può comparire lieve nausea, riduzione dell'appetito, lieve malessere, riduzione precoce dei linfociti, riduzione modesta dei globuli bianchi nella seconda e terza settimana
1 Gy	Nausea in frazione elevata degli individui irradiati, accompagnata in taluni da vomito, astenia, facile affaticamento, alterazione del sangue
2 Gy	Sindrome acuta da radiazioni (forte nausea, vomito, inappetenza,...) con esito talvolta mortale
4 Gy	Sindrome acuta da radiazioni in fase grave; il 50% degli individui non adeguatamente curati muore tra 30 e 60 gg
6 Gy	Sindrome acuta da radiazioni in forma ancora più grave; quasi tutti gli individui muoiono entro 30 gg

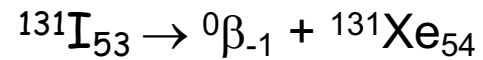
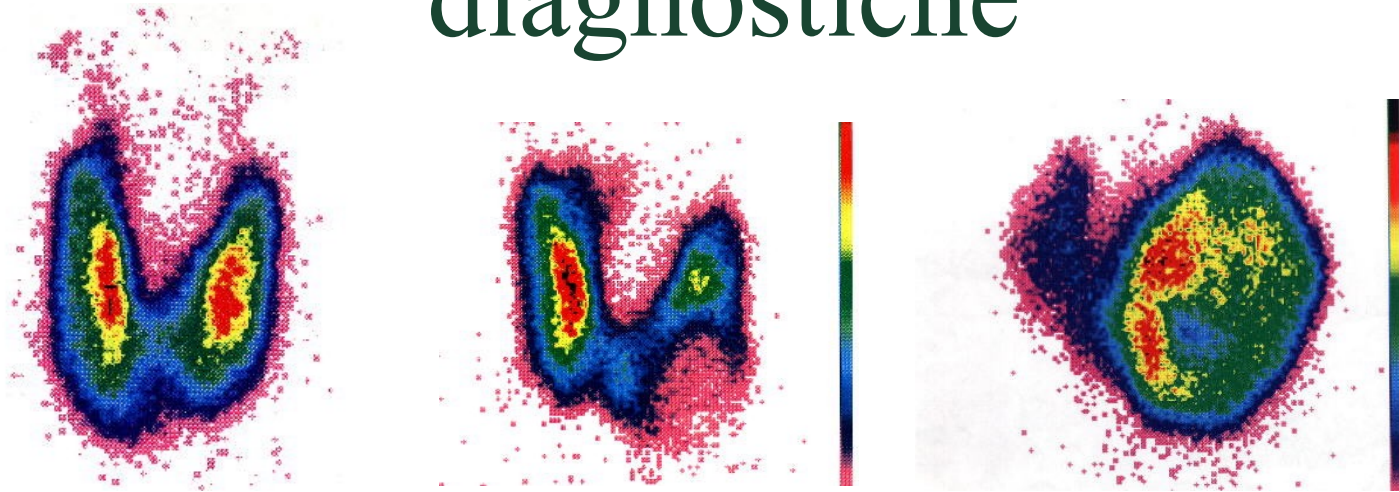
Radioisotopi per tecniche diagnostiche e uso terapeutico

Tomografia a
emissione di
positroni (PET)

Isotopo	Tipo di decadimento	Emivita	Uso in diagnostica medica	
$^{11}_6\text{C}$	Carbonio-11	β^+, γ	20.3 m	Scansione del cervello per tracciare il metabolismo del glucosio
$^{18}_9\text{F}$	Fluoro-18	β^+, γ	109 m	Scansione del cervello per tracciare il metabolismo del glucosio
$^{32}_{15}\text{P}$	Fosforo-32	β	14.3 d	Diagnostica di tumori dell'occhio
$^{51}_{24}\text{Cr}$	Cromo-5	E.C., γ	27.7 d	Diagnosi di albinismo, immagini della milza e del tratto gastro-intestinale
$^{59}_{26}\text{Fe}$	Ferro-59	β, γ	44.5 d	Funzionamento del midollo osseo; diagnosi di anemie
$^{67}_{31}\text{Ga}$	Gallio-67	E.C., γ	78.3 h	Scansione del corpo completa per la diagnosi di tumori
$^{75}_{34}\text{Se}$	Selenio-75	E.C., γ	118 d	Scansione del pancreas
$^{81m}_{36}\text{Kr}$	Criptone-81m	γ	13.3 s	Scansione della ventilazione dei polmoni
$^{81}_{38}\text{Sr}$	Stronzio-81	β	22.2 m	Scansione per le patologie dell'osso, incluso il cancro
$^{99m}_{43}\text{Tc}$	Tecnezio-99m	γ	6.01 h	Scansioni di cervello, fegato, reni; diagnosi del muscolo cardiaco danneggiato
$^{131}_{53}\text{I}$	Iodio-131	β, γ	8.04 d	Diagnosi del malfunzionamento della tiroide
$^{197}_{80}\text{Hg}$	Mercurio-197	E.C., γ	64.1 h	Scansione dei reni
$^{201}_{81}\text{Tl}$	Tallio-20	E.C., γ	3.05 d	Scansione del cuore e test da sforzo

Scintigrafia

Uso degli isotopi radioattivi per tecniche diagnostiche



Esposizioni media alle radiazioni

Sorgente	Dose (mrem/anno)
Radiazioni di fondo	
Raggi cosmici	27
Radiazioni terrestri (rocce, edifici)	28
Interno del corpo umano (K-40 e Ra 226 nelle ossa)	39
Radon nell'aria	200
Totale	294
Radiazioni artificiali	
Raggi X usati a scopo medico ^a	39
Medicina nucleare	14
Prodotti di consumo	10
Impianti nucleari per la generazione di energia	0.5
Altro	1.5
Totale	65
Somma complessiva	359^b

^aProcedure mediche individuali possono esporre alcune parti del corpo a livelli molto più alti. Ad esempio, i raggi X al torace danno 27 mrem e una serie diagnostica GI dà 1970 mrem.

^bLo standard per la salute (governo degli Stati Uniti) indica 5000 mrem/anno come esposizione annuale permessa per i lavoratori. È stato suggerito di abbassare questo livello a 4000 mrem/anno, o anche meno, per ridurre il rischio di "innesco" di tumori anche a basso livello di radiazioni.

FONTE: Consiglio Nazionale per la Protezione dalle Radiazioni e Misura, NCRP Report No. 93 (1993).

Radon

- Radon è un gas a temperatura ambiente e a pressione normali
- Radon è il prodotto di decadimento da Uranio 238 normalmente presente nella crosta terrestre
- Per decadimento, il Radon 222 produce Polonio 218 e Polonio 214 entrambi solidi
- Tumori ai polmoni
- Il radon si infiltra nelle abitazioni da fenditure nelle fondamenta o attraverso le tubature e si accumula nei seminterrati

Uso terapeutico dei Radioisotopi

Radioterapia

- Raggi X o raggi gamma nel caso di tumori localizzati
- Terapia di controllo in seguito ad un intervento chirurgico

Somministrazione di radioisotopi selettivi

- Iodio 125 (tumore alla prostata): emettitore gamma 160 Gy di intensità
- Attinio 225 (tumore alla prostata)

Struttura Elettronica dell'Atomo

- Gran parte della comprensione della struttura elettronica deriva dall'analisi della luce emessa o assorbita dalle sostanze
- La teoria quantistica secondo la quale la luce ha proprietà di particella (teoria fotonica della luce) è essenziale per comprendere la struttura elettronica

Modello Atomico I

Thomson

Rutherford

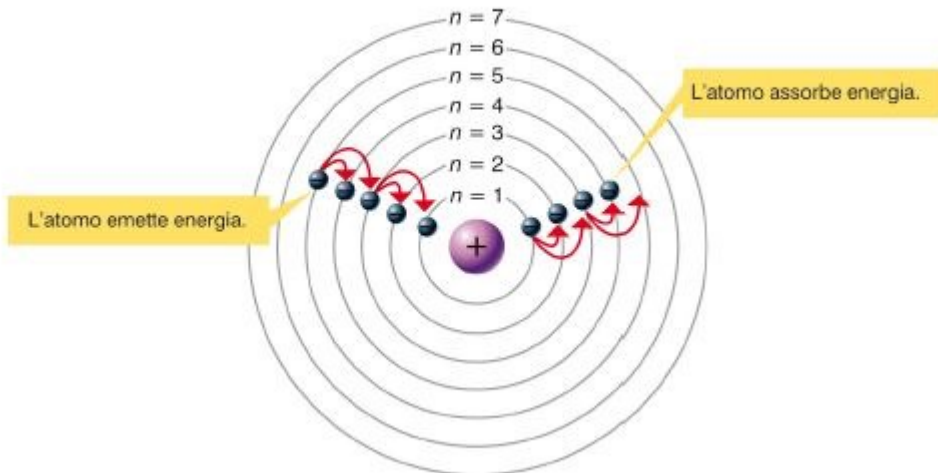
Bohr

1899

1911

1913

1. L'elettrone percorre solo determinate orbite **STAZIONARIE**
2. Le orbite degli elettroni sono **QUANTIZZATE**
3. Per passare da un'orbita all'altra, l'elettrone assorbe energia o emette energia



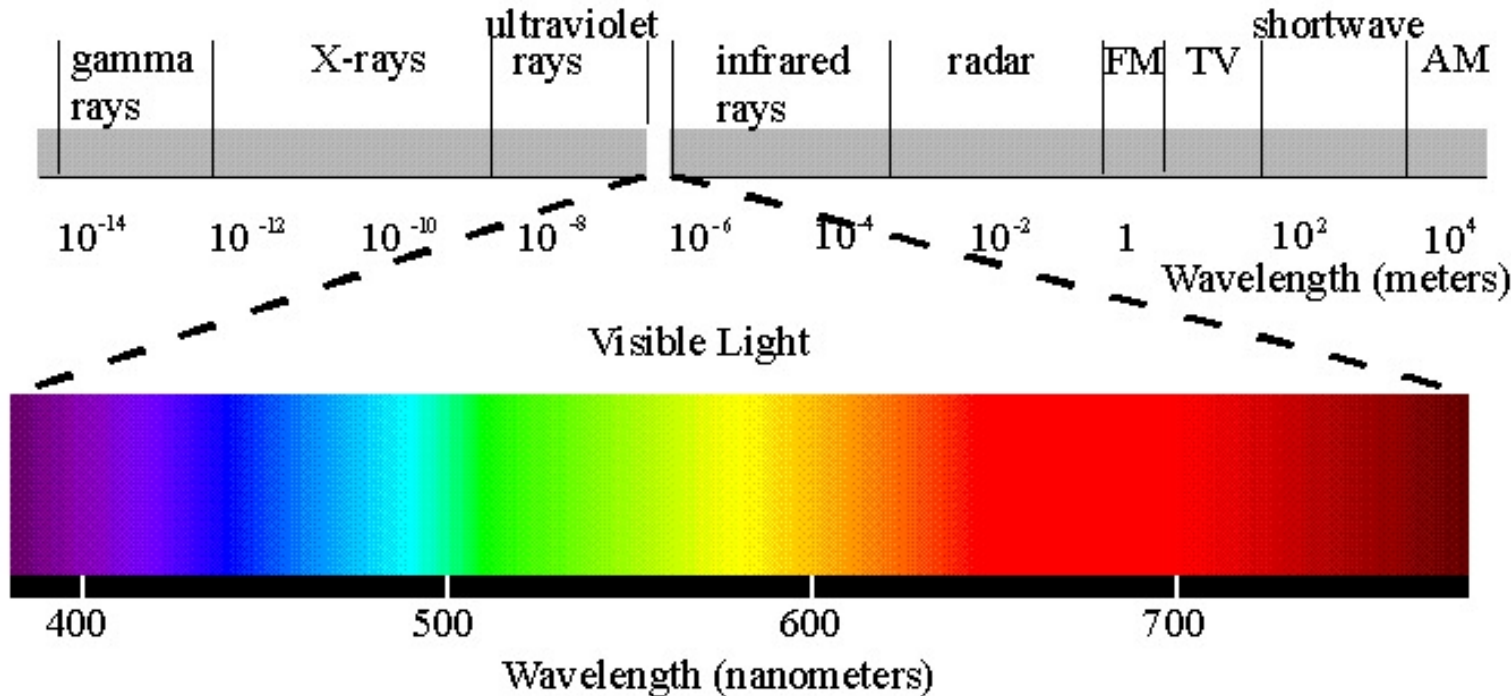
LO SPETTRO DELLA RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

La luce visibile è una porzione ristretta dell'intero spettro.

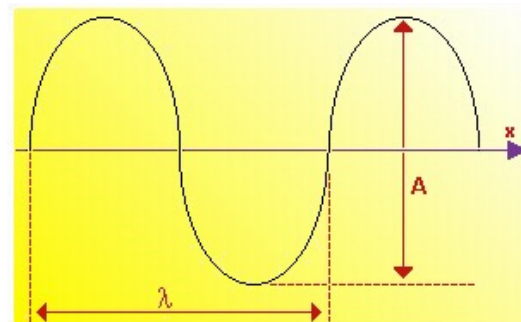
L'energia aumenta al diminuire della lunghezza d'onda (aumento della frequenza).

$$E = h \cdot \nu$$

Nel vuoto le onde si propagano con la stessa velocità ma differiscono per frequenza $c = \lambda \cdot \nu$;



c = velocità della luce
 ν = frequenza
 h = costante di Planck



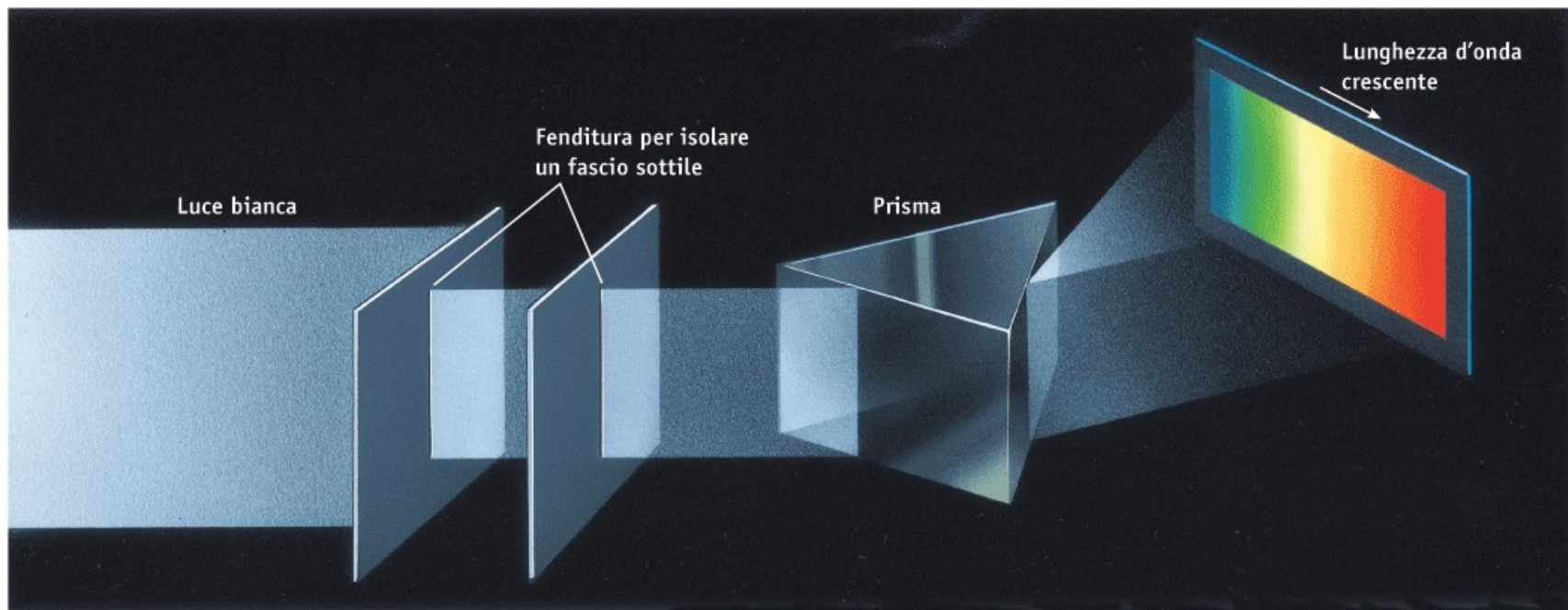


Figura 7.7 Lo spettro della luce bianca, prodotto dalla rifrazione in un prisma. La luce passa prima attraverso una stretta fenditura, che isola un fascio sottile di luce (di solito chiamato riga). Questo fascio di luce viene fatto successivamente passare attraverso un prisma (oppure, negli strumenti più moderni, un reticolo di diffrazione). Vedi anche lo spettro della luce visibile in Figura 7.3.

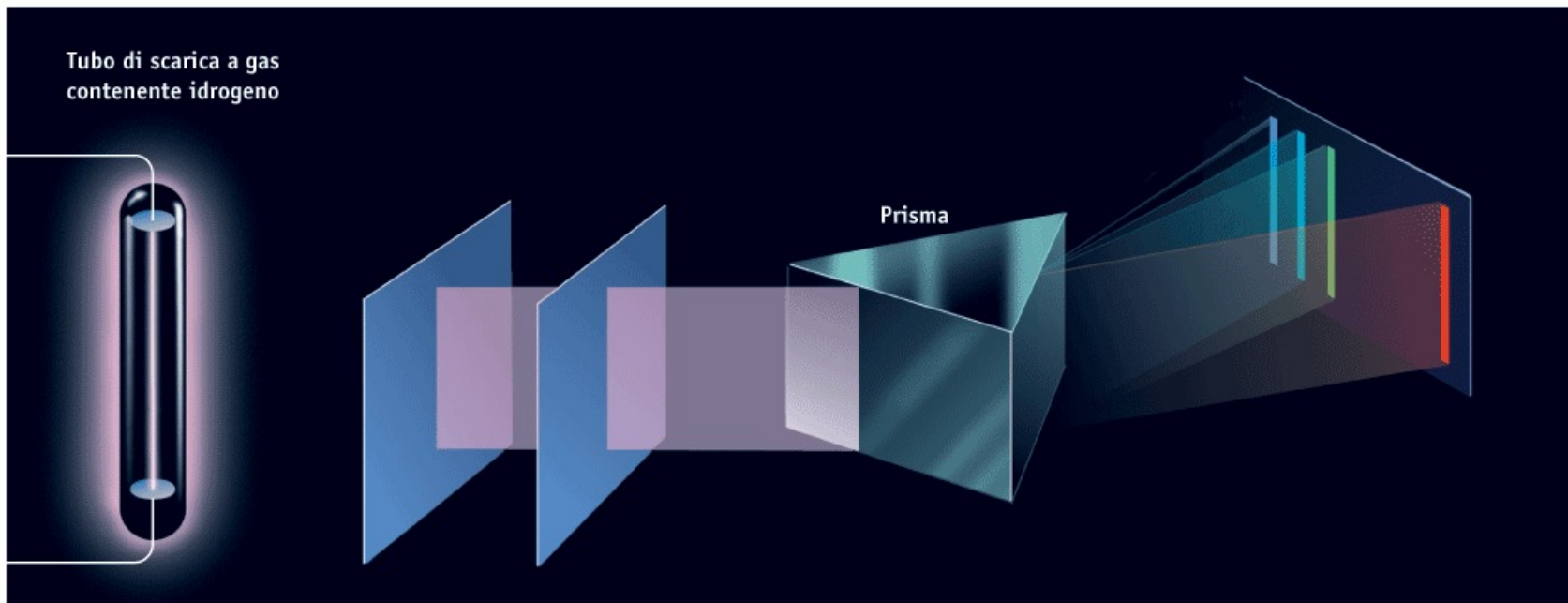
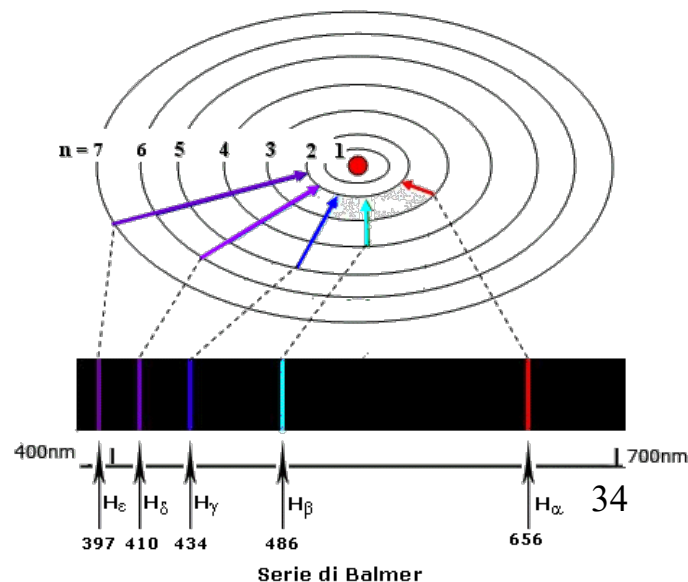


Figura 7.8 Spettro di emissione a righe dell'idrogeno. La luce passa prima attraverso una serie di fenditure per isolare un fascio sottile di luce, che è poi separato nelle sue componenti di diversa lunghezza d'onda per mezzo di un prisma. Una lastra fotografica o una fotocellula evidenziano le singole lunghezze d'onda come righe separate. Da qui, il nome di "spettro a righe" per la luce emessa da un gas luminoso.

Lo spettro di emissione dell'idrogeno rivela la natura quantistica degli orbitali elettronici.

Bohr correla la frequenza delle bande di emissione ai valori di energia degli orbitali elettronici che gli elettroni di H_2 possono occupare



Perché gli atomi si possono combinare tra loro e formare le molecole?

Struttura elettronica dell' atomo

MODELLO DELL' ATOMO DI IDROGENO di BOHR ($Z = 1$ $A = 1$)

- ✓ L' elettrone si muove attorno al protone centrale secondo orbite circolari.
- ✓ Sono consentite solo orbite di un determinato raggio correlato ad un numero intero detto numero quantico principale n . Alle orbite corrispondono altrettante determinate energie (E).
- ✓ L' elettrone si trova nell' orbita il cui raggio è correlato con il più basso n quantico ed il minor contenuto energetico.
- ✓ A seguito dell' assorbimento di E l' elettrone passa da uno stato energetico permesso ad un altro. L' energia assorbita corrisponde esattamente alla differenza di energia ΔE esistente tra i due stati energetici permessi.

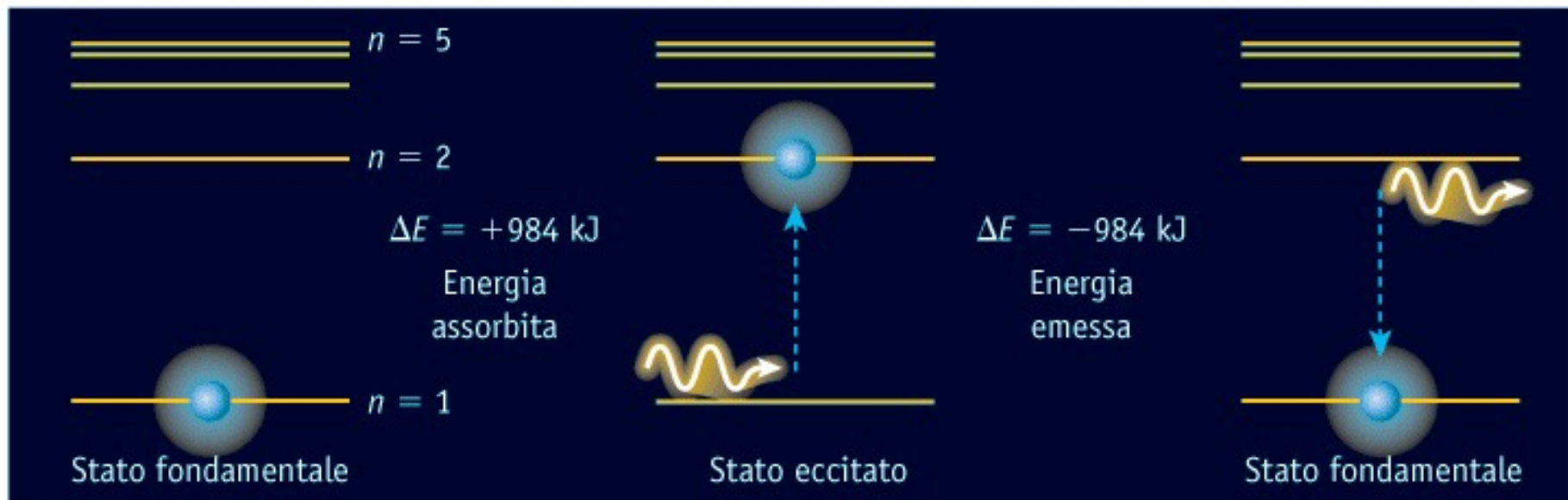
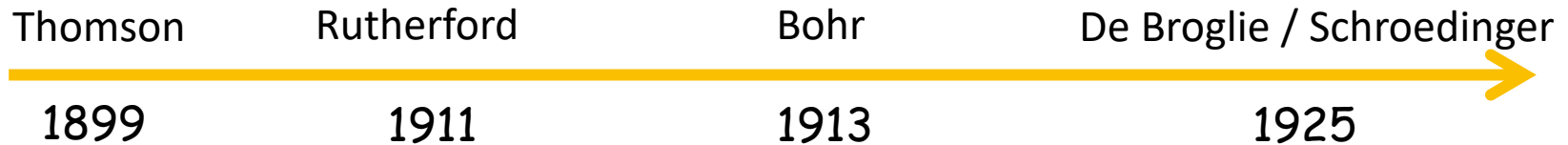
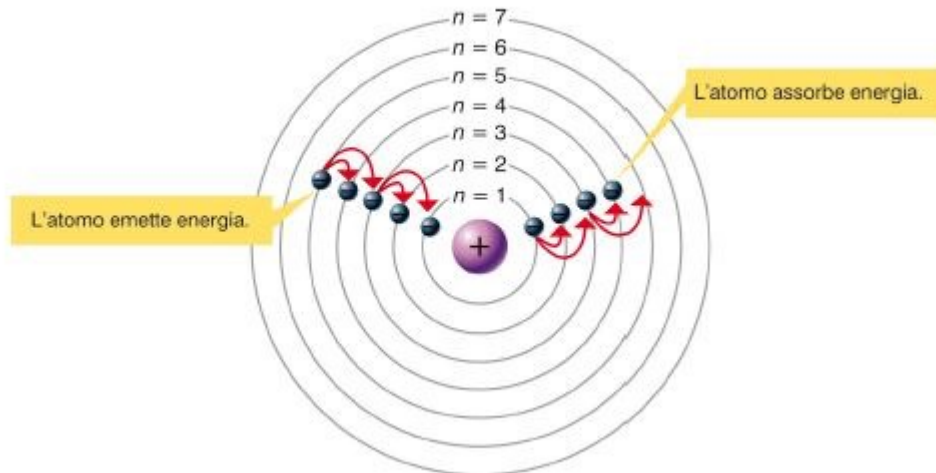


Figura 7.11 Assorbimento di energia da parte di un atomo quando l'elettrone passa ad uno stato eccitato. Quando l'elettrone passa dallo stato con $n = 1$ allo stato con $n = 2$ è assorbita energia ($\Delta E > 0$). Quando l'elettrone ritorna allo stato con $n = 1$ dallo stato con $n = 2$, l'energia è emessa ($\Delta E < 0$).

MODELLO ATOMICO II: TEORIA ATOMICA MODERNA



1. L'elettrone percorre solo determinate orbite **STAZIONARIE**
2. Le orbite degli elettroni sono **QUANTIZZATE**
3. Per passare da un'orbita all'altra, l'elettrone assorbe energia o emette energia



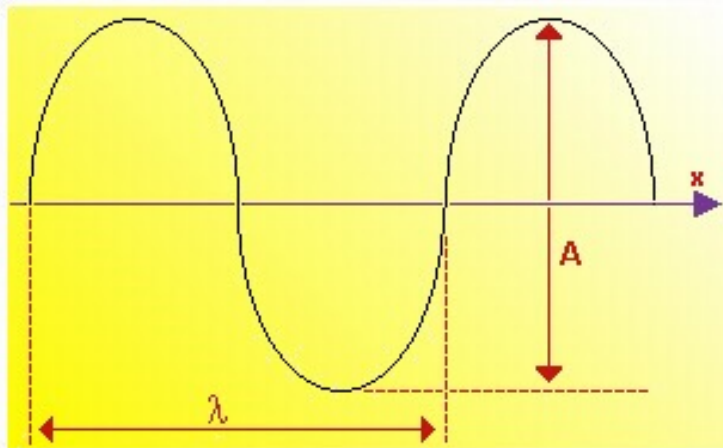
Doppia natura **ONDULATORIA** e **CORPUSCOLARE** dell'elettrone. Ad ogni particella in movimento si può associare un'onda. In seguito Schroedinger definì l'equazione associata a questa onda che definisce la **PROBABILITA'** di occupazione intorno al nucleo

IL FOTONE: NATURA ONDULATORIA (radiazione elettromagnetica) E CORPUSCOLARE (Einstein, effetto fotoelettrico) DELLA MATERIA

All' elettrone in moto nella propria orbita circolare attorno al nucleo deve essere associata una lunghezza d' onda (λ) che dipende dalla massa della particella (m) e dalla velocità (v).

$$\lambda = h/mv \quad \text{Eq. di De Broglie}$$

(h è la costante di Planck).



L. De Broglie
1892-1987

DESCRIZIONE QUANTOMECCANICA DELL' ATOMO

Descrizione matematica delle proprietà ondulatorie dell' elettrone. La descrizione quantomeccanica completa di un atomo consiste in un insieme di funzioni d' onda.

- ✓ La funzione d' onda Ψ descrive gli stati energetici accessibili all' elettrone.

$$\frac{\delta^2 \psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 \psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 \psi}{\delta z^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

Equazione di Schrodinger

- ✓ Gli stati d' energia permessi coincidono con quelli previsti dal modello di Bohr tuttavia, per il principio di indeterminazione, non è possibile specificare allo stesso tempo la posizione e la velocità di una particella $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.
- ✓ Nel modello quantomeccanico si parla della probabilità (Ψ^2) che l' elettrone si trovi in una determinata regione dello spazio.

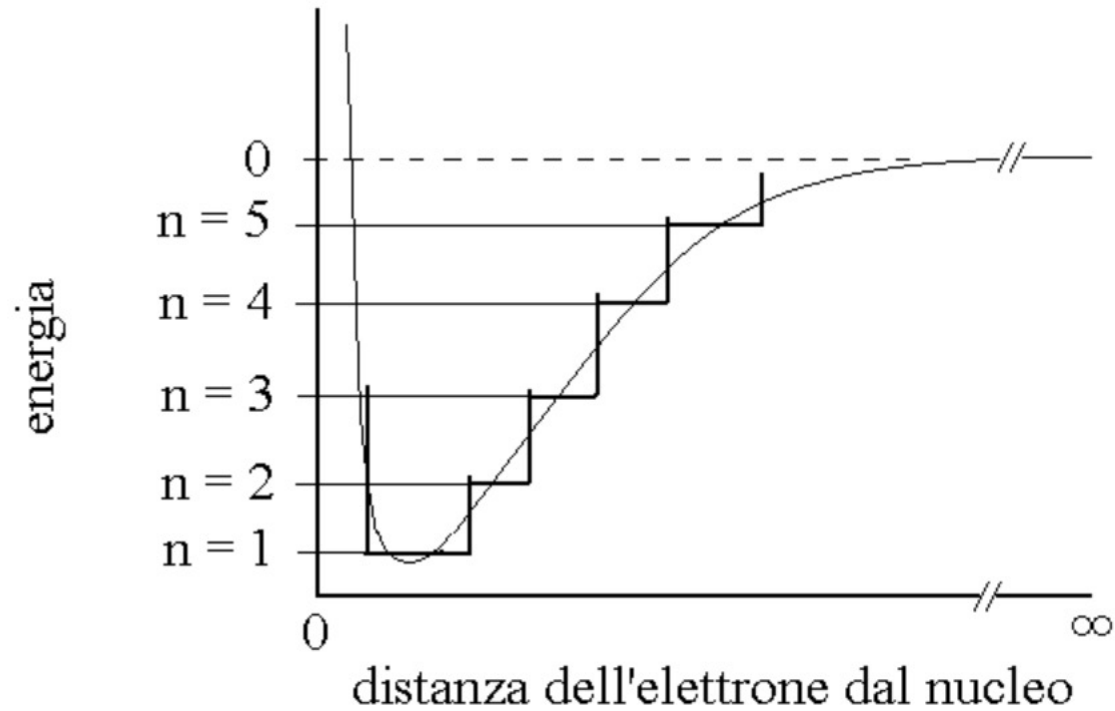
ORBITALI

Ciascuna funzione d'onda che descrive il moto di un elettrone corrispondente ad un dato livello energetico prende il nome di ORBITALE ATOMICO.

Il modello quantomeccanico prevede 3 numeri quantici (n, l, m) caratteristici per ciascun orbitale.

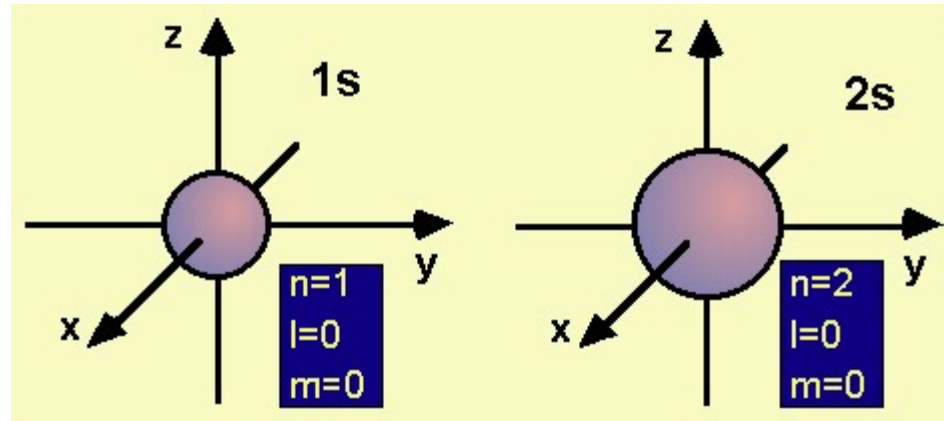
✓ **N. quantico principale n** : correlato con la distanza media dell'elettrone dal nucleo. Definisce il livello energetico. Può assumere **valori interi** (1, 2, 3...). I livelli energetici hanno la forma di gusci sferici cavi e concentrici.

Energetica dei gusci elettronici



Rappresentazione grafica degli orbitali

Orbitali di tipo s



ORBITALI

Ciascuna funzione d'onda che descrive il moto di un elettrone corrispondente ad un dato livello energetico prende il nome di ORBITALE ATOMICO.

Il modello quantomeccanico prevede 3 numeri quantici (n, l, m) caratteristici per ciascun orbitale.

✓ **N. quantico principale n** : correlato con la distanza media dell'elettrone dal nucleo. Definisce il livello energetico. Può assumere valori interi (1, 2, 3...). I livelli energetici hanno la forma di gusci sferici cavi e concentrici.

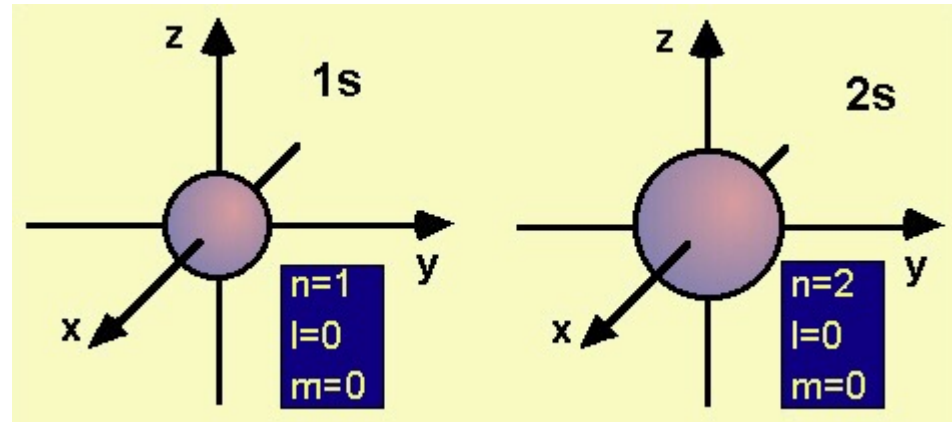
✓ **N. quantico azimutale l** : correlato con la forma dell'orbitale. Può assumere valori interi positivi da 0 ad $n-1$.

l	0	1	2	3	4
Orbitale	s	p	d	f	g

✓ **N. quantico magnetico m** : correlato con l'orientamento dell'orbitale nello spazio. Può assumere valori interi da $-l$ ad l . L'orbitale p (qualunque $n, L=1$) può assumere 3 valori di m : -1, 0, +1; ogni livello energetico superiore al primo contiene 3 orbitali p ciascuno ortogonale al piano definito dagli altri due e definiti come p_x, p_y e p_z .

Rappresentazione grafica degli orbitali

Orbitali di tipo s

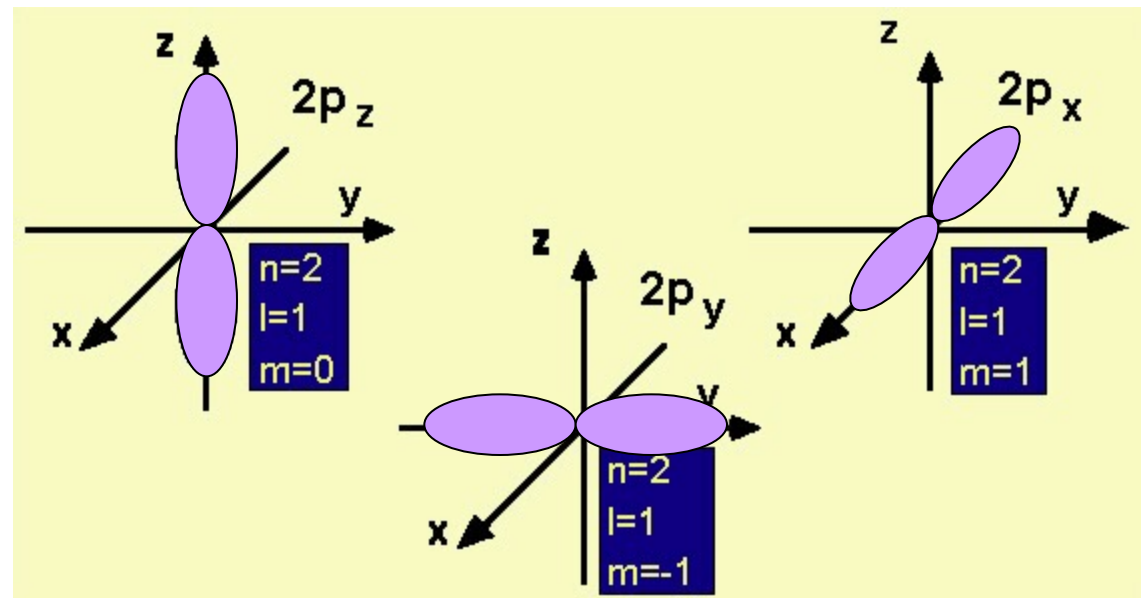


Orbitali di tipo p

$n = 1, 2, 3 \dots$

$l = \text{da } 0 \text{ a } n-1$

$m = \text{da } -l \text{ a } l$



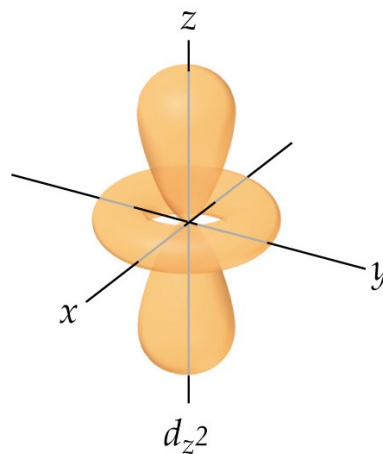
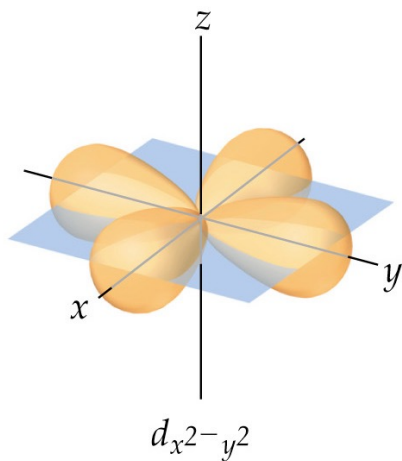
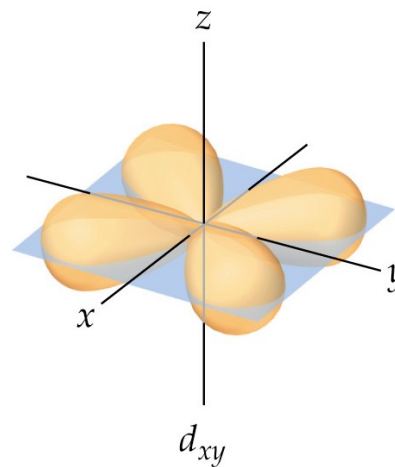
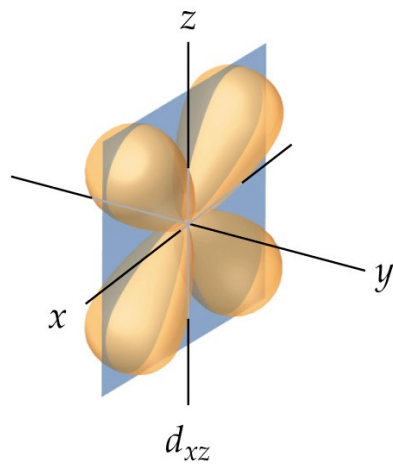
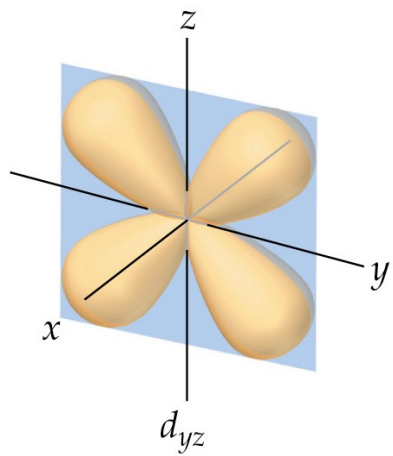
Orbitali dei primi 3 livelli energetici

n	l	m	orbitale: s	orbitale: p	orbitale: d
1	0	0	1s		
2	0	0	2s		
2	1	0		2p _z	
2	1	1		2p _x	
2	1	-1		2p _y	
3	0	0	3s		
3	1	0		3p _z	
3	1	1		3p _x	
3	1	-1		3p _y	
3	2	0			3d _{z²}
3	2	1			3d _{xz}
3	2	-1			3d _{yz}
3	2	2			3d _{xy}
3	2	-2			3d _{x²-y²}

$n = 1, 2, 3 \dots$

$l = \text{da } 0 \text{ a } n-1$

$m = \text{da } -l \text{ a } l$



$$n = 3$$

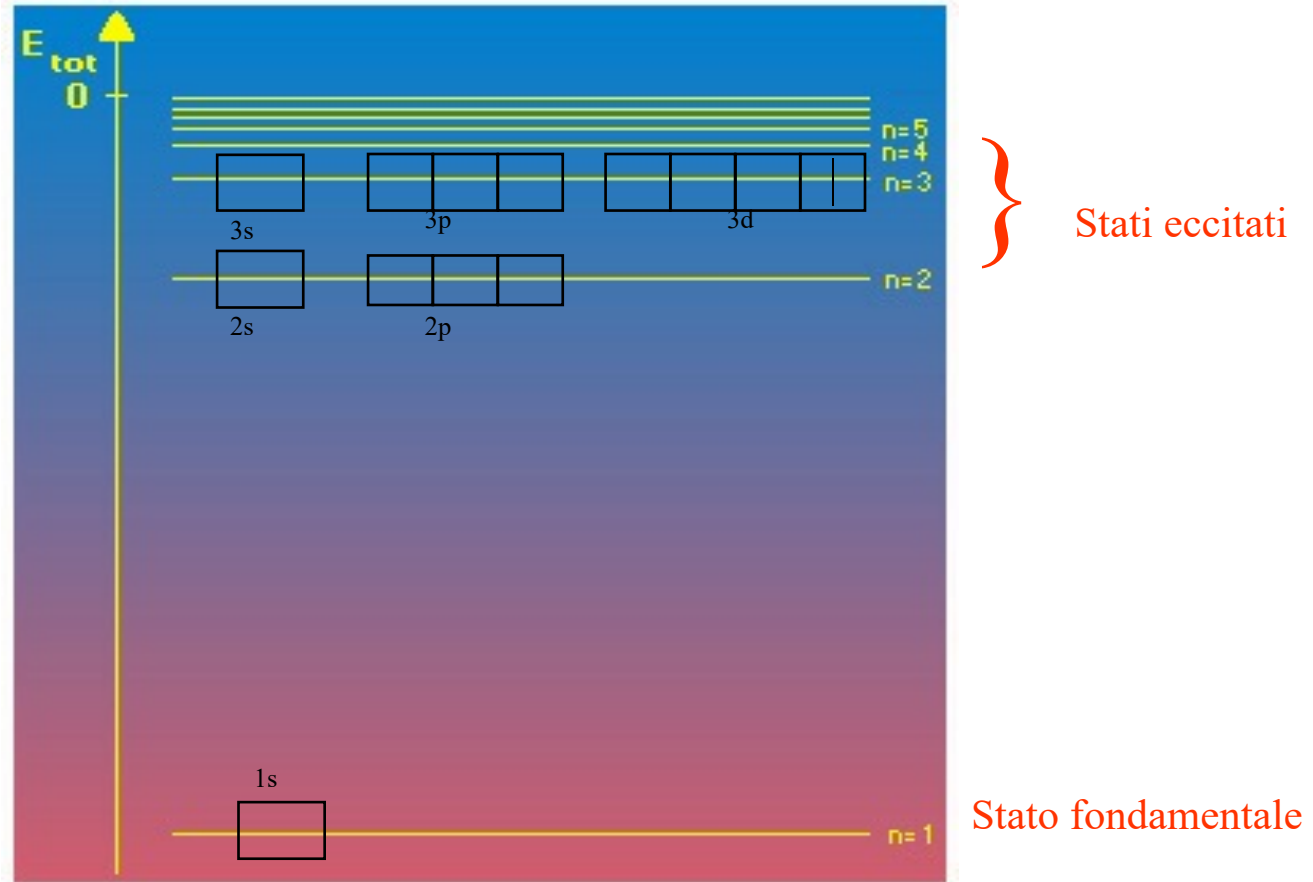
$$l = 2$$

$$m = da - 2 \text{ a } 2$$

Orbitali di tipo d

Schema dei livelli energetici orbitali in un atomo monoelettronico (H)

Tutti gli orbitali cui corrisponde lo stesso valore del n. quantico principale n possiedono la medesima energia

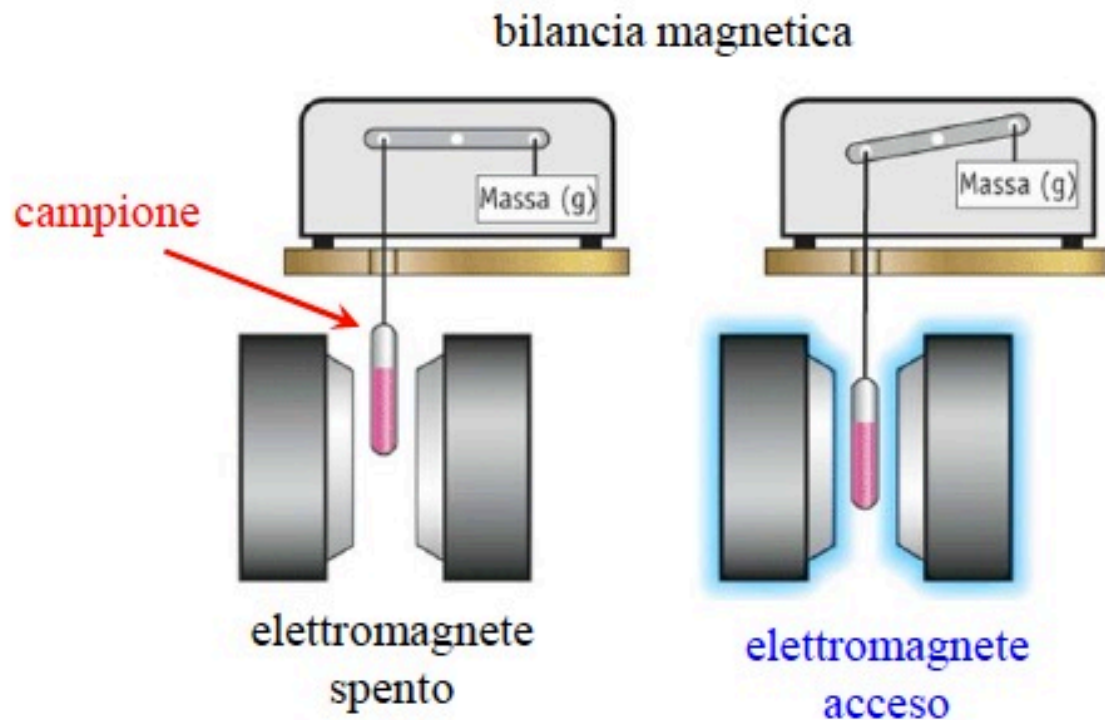


Il IV numero quantico: lo spin elettronico

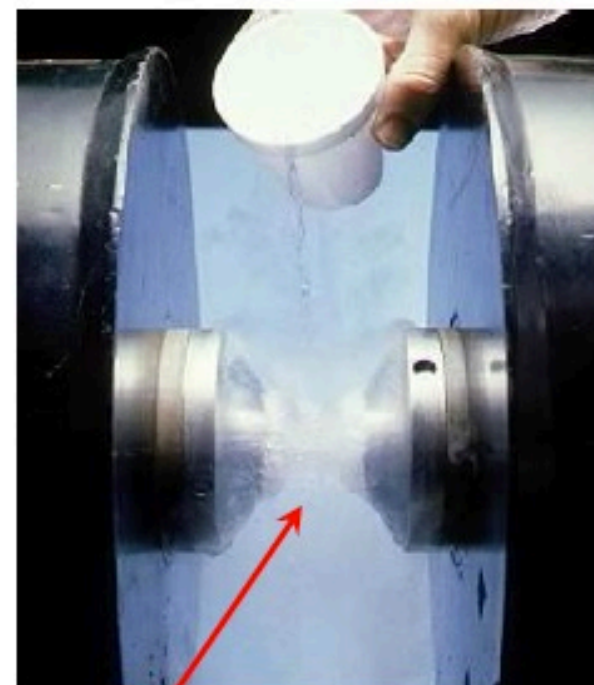
N. quantico di spin s (importante per gli atomi polielettronici): correlato con il momento associato al moto di spin dell'elettrone. Può assumere valori $+1/2$ e $-1/2$.

Il paramagnetismo

Atomi, ioni, molecole con elettroni spaiati sono paramagnetici e sono attratti da un campo magnetico.



L' N_2 , che non ha elettroni spaiati, è diamagnetico e non è attratto dai poli di un magnete



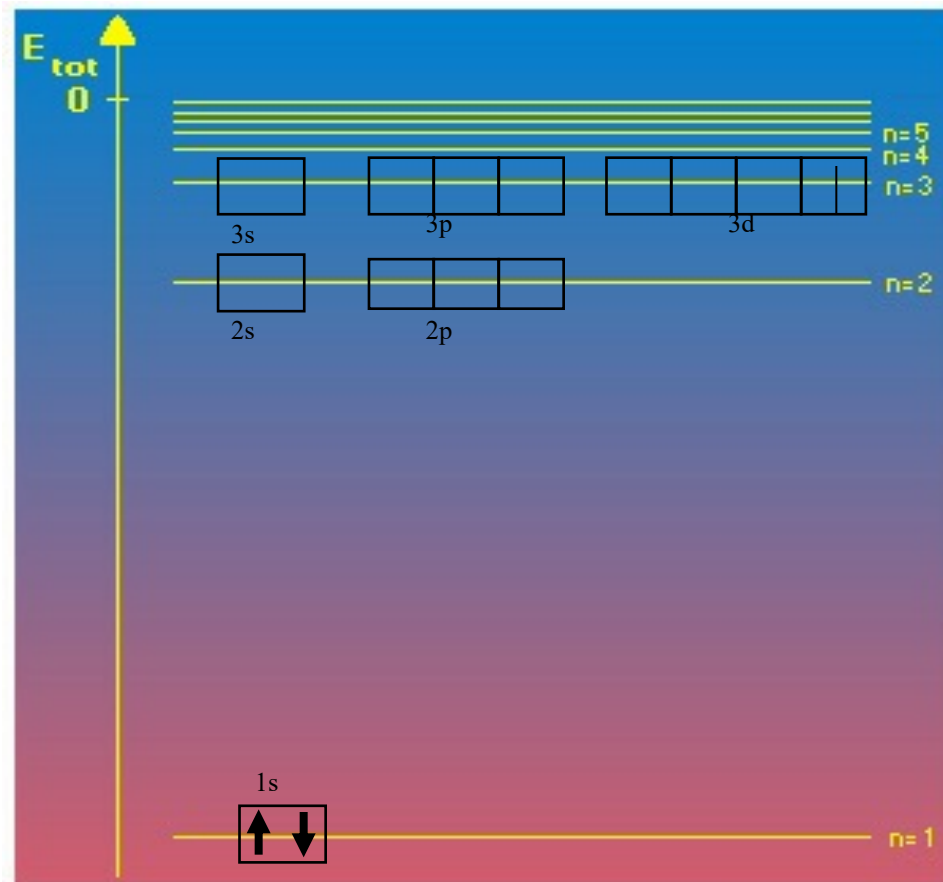
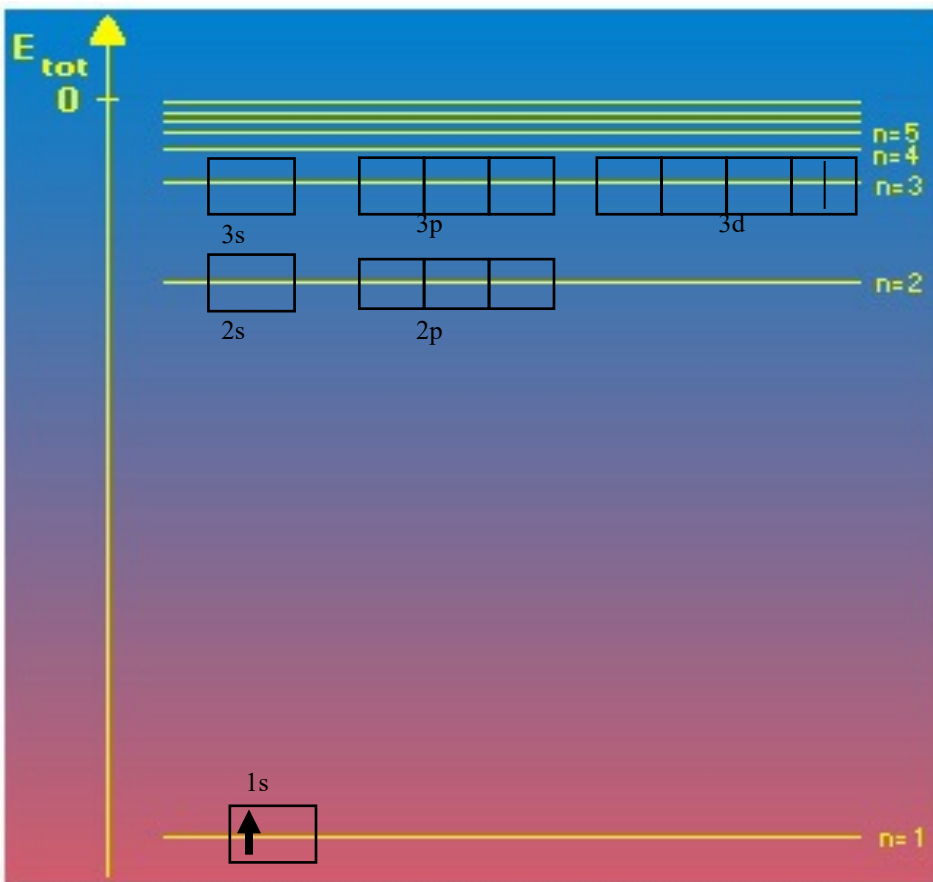
L' O_2 ha 2 elettroni spaiati ed è paramagnetico. L' O_2 liquido ($-182\text{ }^\circ\text{C}$) è attratto dai poli di un potente magnete.

Il termine **AUFBAU** (in tedesco, "costruzione") e rappresenta la costruzione della configurazione elettronica degli atomi, disponendo attorno al nucleo contenete un numero Z di protoni un ugual numero di elettroni.

Principio di minima energia: ogni elettrone occupa l'orbitale disponibile a energia più bassa.

Principio di Pauli: in un atomo non possono esistere 2 elettroni con i 4 numeri quantici eguali; perciò, nello stesso orbitale, possono esserci 2 soli elettroni purché con momento di spin diverso.

Regola di Hund: se due o più elettroni occupano orbitali degeneri (cioè a eguale energia), gli elettroni occupano il maggior numero possibile di questi orbitali, e a spin paralleli.



H; $Z = 1$

$1s$

He; $Z = 2$

$1s^2$

Z	simbolo elettronico	rappresentazioni della configurazione elettronica	
3	●Li	(He) 2s ↑	$1s^2 2s^1$
4	●●Be	(He) 2s ↑↓	$1s^2 2s^2$
5	●●B ●	(He) 2s ↑↓ 2p ↑	$1s^2 2s^2 2p^1$
6	●●C ●	(He) 2s ↑↓ 2p ↑ ↑	$1s^2 2s^2 2p^2$
7	●●N ●	(He) 2s ↑↓ 2p ↑ ↑ ↑	$1s^2 2s^2 2p^3$
8	●●O ●●	(He) 2s ↑↓ 2p ↑↓ ↑ ↑	$1s^2 2s^2 2p^4$
9	●●F ●●	(He) 2s ↑↓ 2p ↑↓ ↑↓ ↑	$1s^2 2s^2 2p^5$
10	●●Ne ●●	(He) 2s ↑↓ 2p ↑↓ ↑↓ ↑↓	$1s^2 2s^2 2p^6$
11	●Na	(Ne) 3s ↑	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

↑
Strutture di Lewis

CONFIGURAZIONE ELETTRONICA E CLASSIFICAZIONE DEGLI ELEMENTI

La scoperta di numerosi nuovi elementi nel XIX secolo ebbe come conseguenza naturale quella di tentarne una classificazione.

Mendeleev dispose gli elementi in ordine di numero atomico Z crescente, mettendo in luce il carattere periodico delle loro proprietà chimiche e fisiche (Tavola Periodica).

Gruppi (colonne della tabella): elementi che hanno la stessa configurazione elettronica esterna.

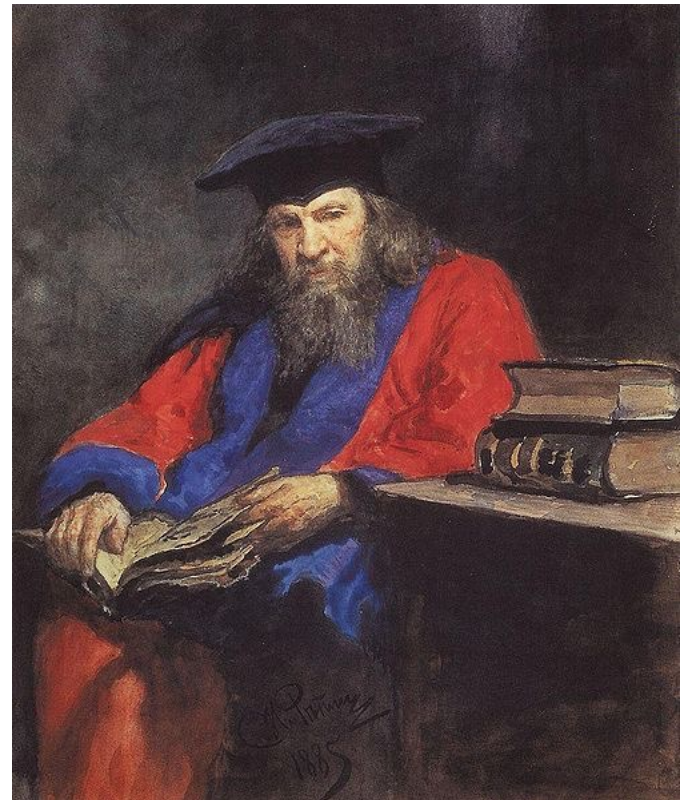
Periodi (righe della tabella): inizia con un elemento che ha come configurazione elettronica esterna un elettrone di tipo s e procede aumentando di una unità il numero atomico Z ad ogni passaggio. Gli elettroni più esterni hanno lo stesso numero quantico n .

Dmitri Mendeleev formulò la **tavola periodica degli elementi** nel 1869.

A differenza di altri contributori alla tavola, Mendeleev fornì un sistema di classificazione che riusciva a prevedere le caratteristiche di elementi non ancora scoperti.

Dmitri Mendeleev nato a Tobolsk
Siberia (1834-1907).

Rassegnò le dimissioni dall'università il 17 agosto 1890,
quando il governo russo rigettò un progetto di riforma degli studi
presentato dai suoi studenti.



CONFIGURAZIONE ELETTRONICA E CLASSIFICAZIONE DEGLI ELEMENTI

La scoperta di numerosi nuovi elementi nel XIX secolo ebbe come conseguenza naturale quella di tentarne una classificazione.

Mendeleev dispose gli elementi in ordine di peso atomico crescente, mettendo in luce il carattere periodico delle loro proprietà chimiche e fisiche (Tavola Periodica)

Reihen	Gruppo I. — R ⁰	Gruppo II. — R ⁰	Gruppo III. — R ⁰ ³	Gruppo IV. RH ⁴ R ⁰ ⁴	Gruppo V. RH ⁵ R ⁰ ⁵	Gruppo VI. RH ⁶ R ⁰ ⁶	Gruppo VII. RH R ⁰ ⁷	Gruppo VIII. — R ⁰ ⁸
1	II=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Tc=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	— — — —
9	(—)	—	—	—	—	—	—	
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	— — — —

Tavola periodica degli elementi

Gruppo

Periodo

Numero atomico

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



Metalli



Alogeni



Metalli alcalini



Gas inerti



Elementi di transizione: orbitali *d* ed *f* in corso di riempimento

Come sono disposti gli elettroni negli orbitali in ciascuno degli elementi della tavola periodica?

$n = 1$

Stato fondamentale: elettroni in condizioni di minima E

L' orbitale 1s (che corrisponde a $n = 1, l = 0, m = 0$) è l' orbitale con E piu' bassa

Principio di Pauli e costruzione degli atomi di H ($1s^1$) e He ($1s^2$)

Completato il riempimento dell' unico orbitale di n. quantico principale $n = 1$

$n = 2$

Si comincia a popolare l' orbitale di max. stabilità dopo l' 1s e cioè il 2s (Li = $1s^2 2s^1$): nuovo guscio, nuovo periodo (Be = $1s^2 2s^2$)

Elemento	n. totale elettroni	Configurazione elettronica
H	1	$1s^1$
He	2	$1s^2$
Li	3	$1s^2 2s^1$
Be	4	$1s^2 2s^2$
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$

Regola di Hund: gli elettroni si dispongono occupando tutti gli orbitali degeneri disponibili

Nei Gruppi si trovano elementi con la stessa configurazione elettronica esterna.

Metalli (Gruppo I):

Elemento	n. totale elettroni	Configurazione elettronica
Li	3	$1s^2 2s$
Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$

Metalli alcalini (Gruppo II)

Elemento	n. totale elettroni	Configurazione elettronica
Be	4	$1s^2 2s^2$
Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Alogeni (Gruppo VII)

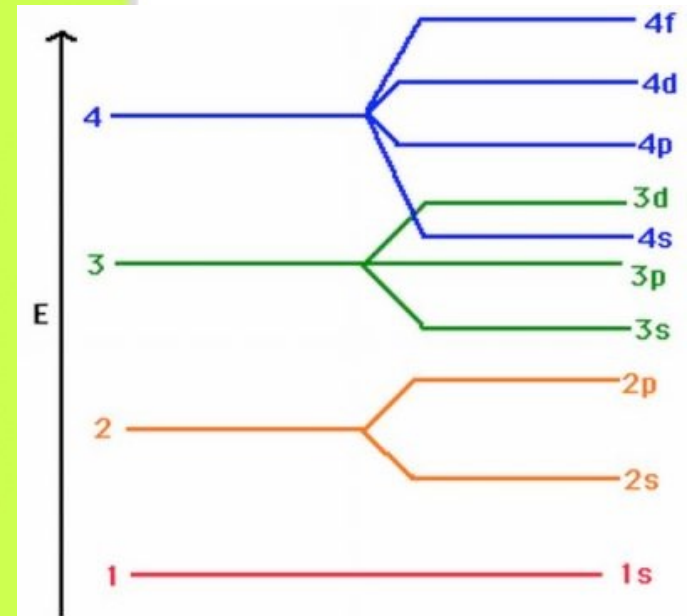
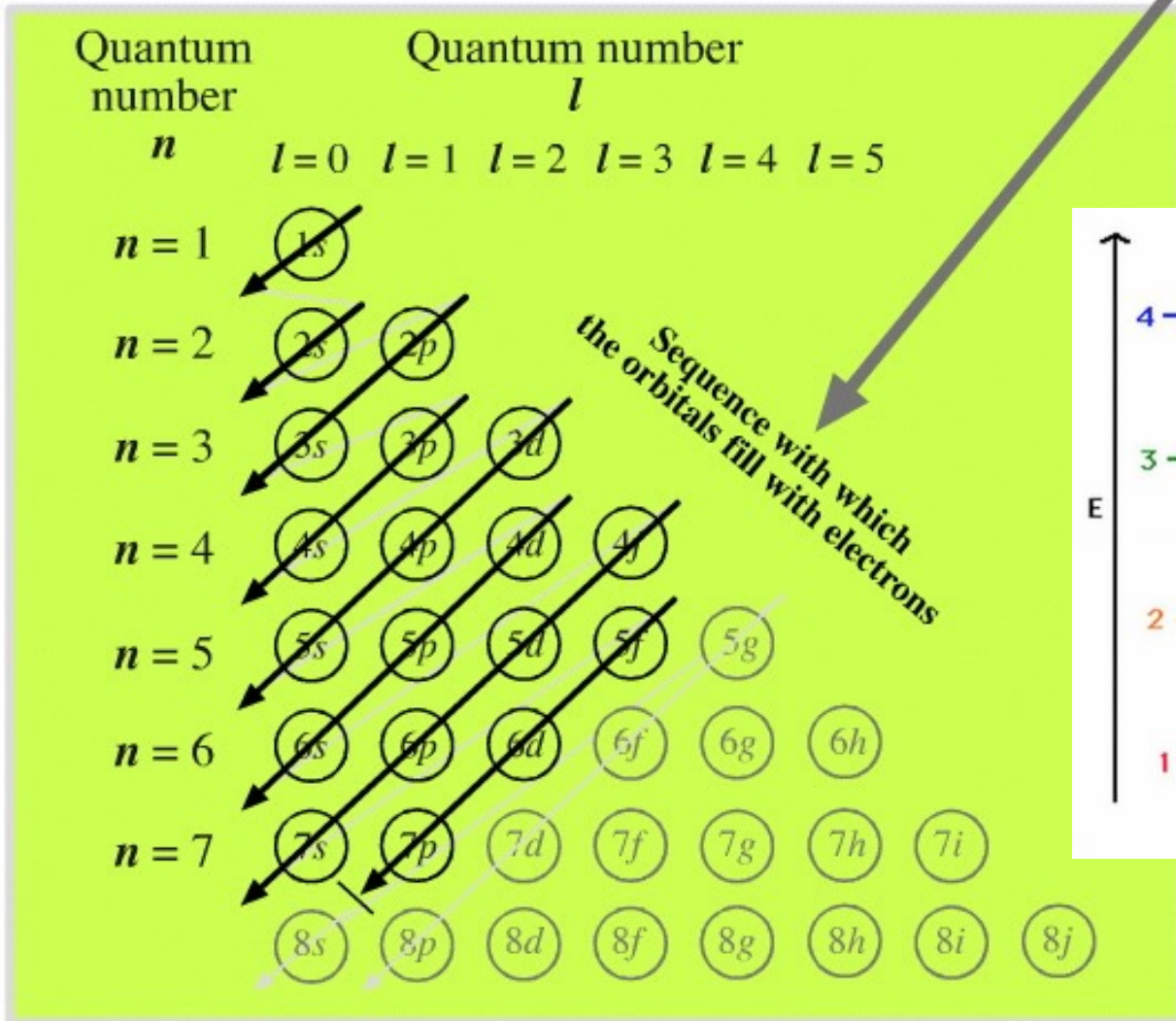
Elemento	n. totale elettroni	Configurazione elettronica
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Gas rari (Gruppo 0)

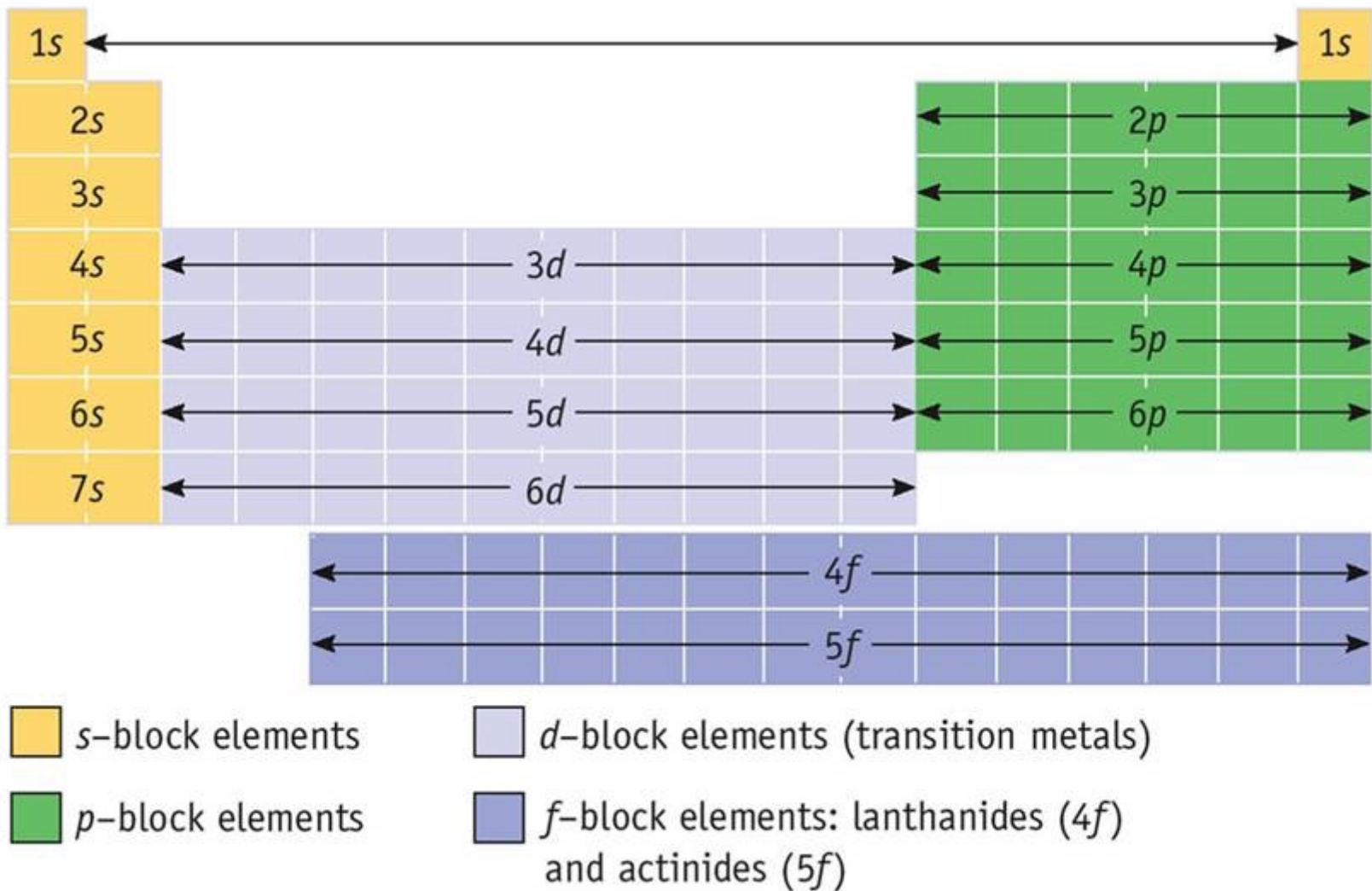
La configurazione corrispondente al riempimento totale degli orbitali s e p ad opera degli 8 elettroni che essi sono in grado di contenere risulta in una estrema stabilità (elementi dotati di elevata energia di ionizzazione, bassa affinità elettronica e non reattivi).

Elemento	n. totale elettroni	Configurazione elettronica
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

L'ordine di riempimento degli orbitali



Gli orbitali si riempiono per $n+l$ crescente. A parità di $n+l$, si riempirà prima quello con n più basso.



© 2006 Brooks/Cole - Thomson

Ordine di riempimento degli orbitali e tavola periodica

Energia di ionizzazione (I)

E' l'energia necessaria ad asportare un elettrone da un atomo o da uno ione.

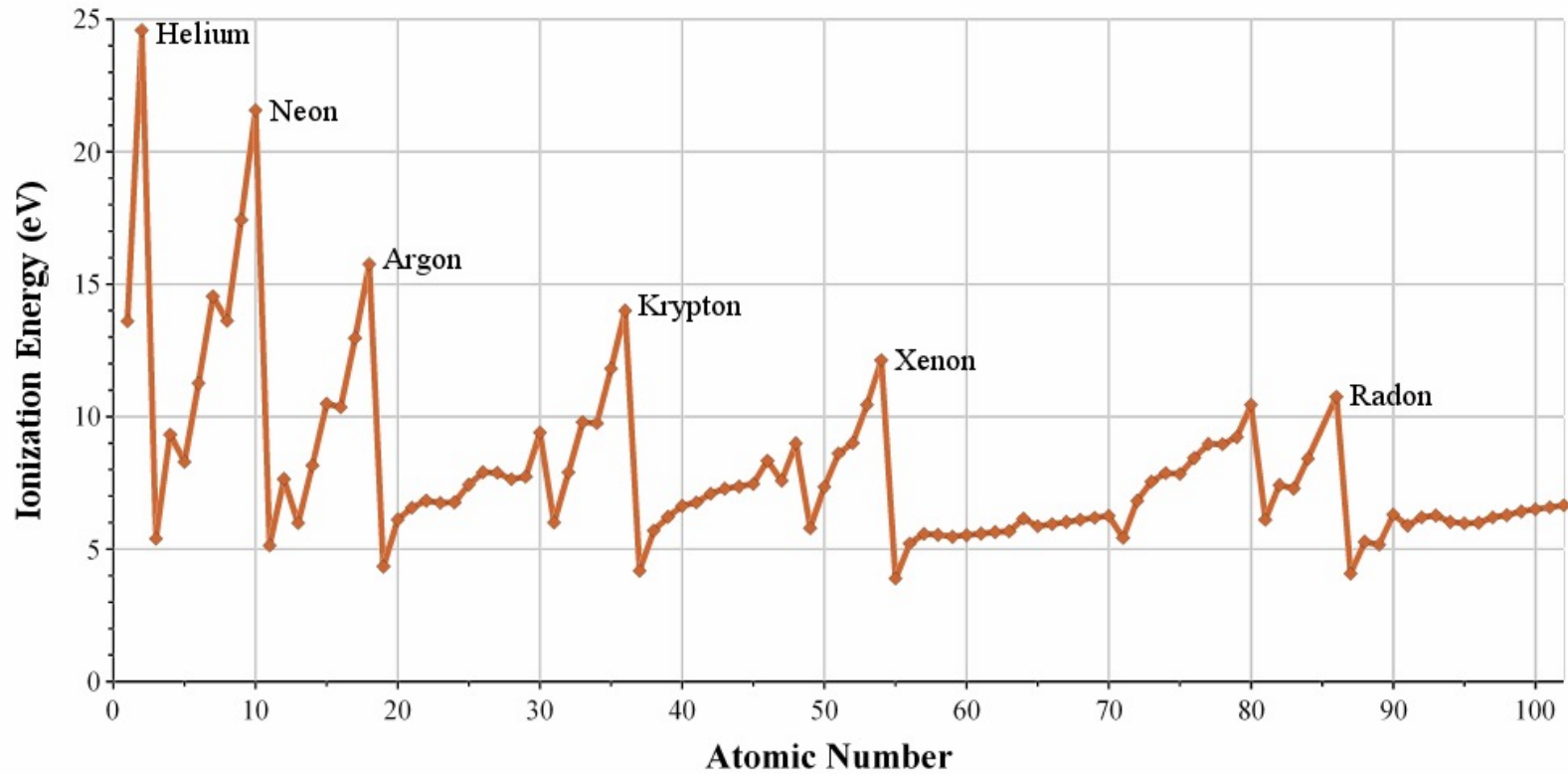
$X \rightarrow X^+ + e^-$ Energia di prima ionizzazione

$X^+ \rightarrow X^{++} + e^-$ Energia di seconda ionizzazione

Tanto maggiore I tanto più intensa l'attrazione dell'elettrone all'interno dell'atomo o dello ione.

I aumenta ad ogni successivo elettrone che si vuole allontanare (diminuisce l'effetto schermo degli elettroni)

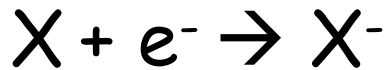
I aumenta verso destra lungo un periodo, diminuisce scendendo lungo un gruppo.



Periodicità dell' energia di ionizzazione

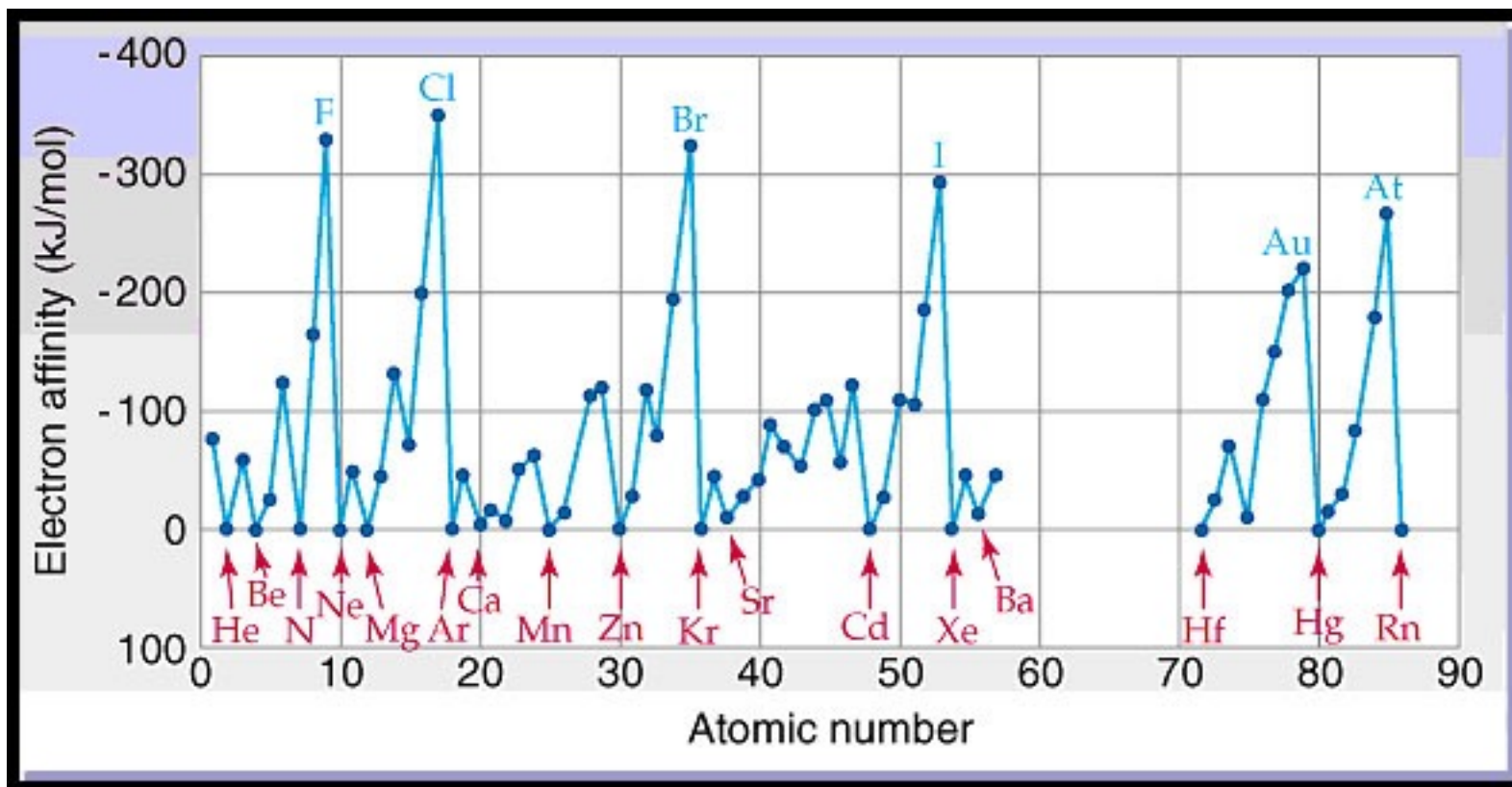
Affinità elettronica

E' l'energia associata al processo di addizione di un elettrone ad un atomo o ad uno ione.



Per la maggior parte degli atomi e per tutti gli ioni positivi l'aggiunta di un elettrone determina una cessione di energia (E ha segno negativo).

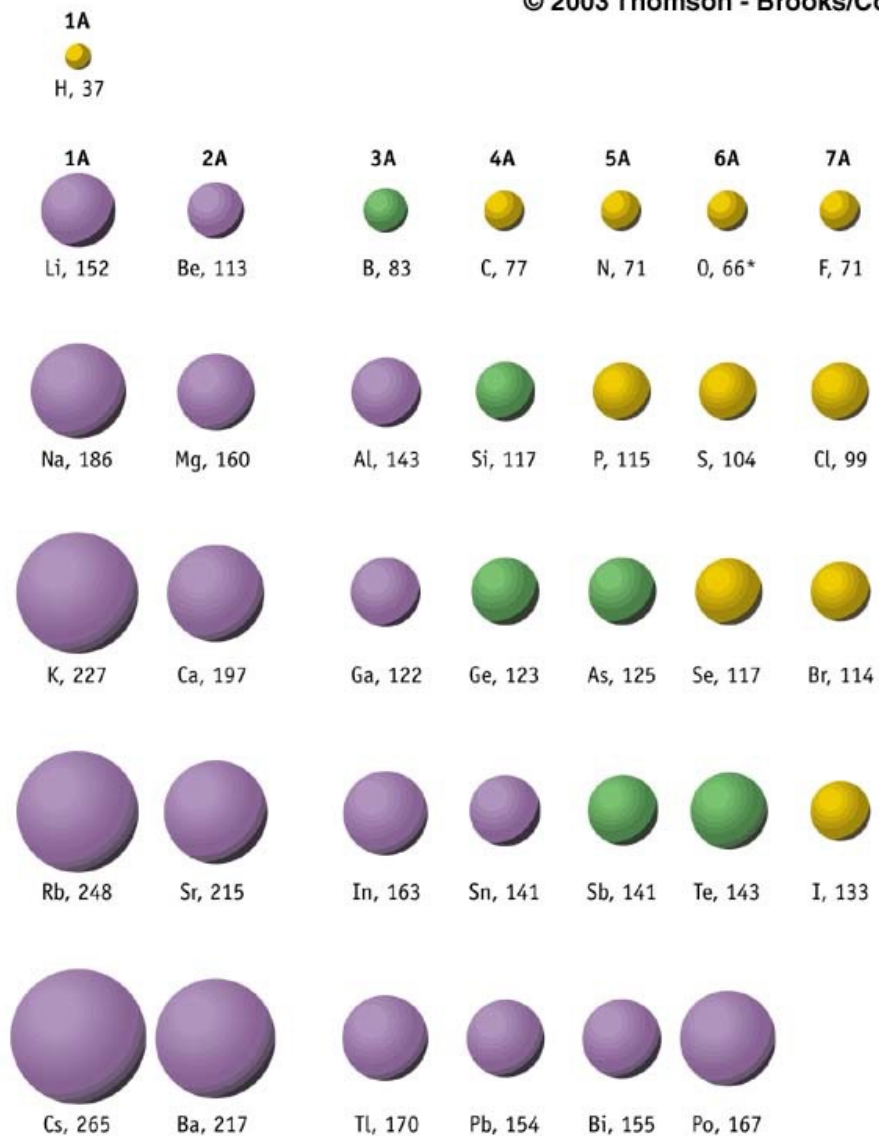
L'affinità elettronica generalmente è più negativa verso destra lungo un periodo (eccezione gas rari) e verso l'alto all'interno di ciascun gruppo.



Periodicità dell' affinità elettronica.

Elettronegatività

E' la capacità di attrarre l'elettrone di valenza nella propria nube elettronica. Questa tendenza è analoga all'affinità elettronica e sarà importante nella descrizione dei legami chimici.



Periodicità dei raggi atomici per i gruppi principali.

Periodicità delle proprietà degli atomi

