



Cristiano Zambon (obiuan)

## APPUNTI DI CHIMICA - LEZ [1] - [4]

3 March 2014

### Introduzione

Salve a tutti. Sono di nuovo qui con una *pubblicazione*, ma questa volta di tono e con scopo completamente diverso dalle precedenti. Diciamo così: il partecipare a discussioni e post su EY mi ha fatto capire quanto poco io mi ricordi delle basi della scienza, e quanto io negli anni mi sia allontanato dalla figura di *scienziato* per asintotare a quella di *tecnico*. Non so se l'ho mai voluto, da bambino volevo fare l'inventore quindi forse sì, ma ora grazie a questo forum ed alle competenze teoriche di molti dei partecipanti, quella *sete di conoscenza* che avevo all'Università mi è tornata forse addirittura amplificata, e di questo sono grato a EY. In una prima fase, ho provato a recuperare almeno parte delle conoscenze perdute dai libri, ma mi sono presto reso conto che il tempo a disposizione era veramente troppo poco. Così ho cercato nel web delle video lezioni e sono approdato a diversi siti che rendono pubbliche lezioni universitarie filmate dagli studenti.

Scaricato tutto, mi sono buttato all'inizio sulla chimica, che secondo me è la scienza che marca il confine fra uno scienziato e un tecnico. Mano a mano che seguo le lezioni e studio, prendo degli appunti che integro poi con considerazioni personali quando (ri)facio mio il concetto, e per farlo utilizzo l'ottimo editor per articoli di EY, che mi dà la possibilità di importare sia schemi FidoCadJ che di usare il LaTeX per le formule. A questo punto, una volta seguite le prime quattro lezioni, mi sono accorto che i miei appunti erano facilmente trasformabili in un *testo di riferimento* dove ovviamente non si troveranno informazioni nuove, ma semplicemente un riassunto schematico dei concetti e delle formule spiegate in un corso di Chimica alla facoltà di ingegneria. Così ho deciso di pubblicarlo, intanto le prime 4 lezioni, e poi di 4 in 4, nella convinzione che potrebbe forse essere utile a qualcuno.

### Particelle atomiche, numero Atomico, numero di massa e unità di massa atomica

Ciascun atomo è composto da un nucleo e da elettroni. Il nucleo contiene i nucleoni, che si dividono in protoni e e neutroni.

- Protoni: carica (+)  $1,6022 \cdot 10^{-19}$  C, massa: (+)  $1,673 \cdot 10^{-27}$  kg

- Neutroni: nessuna carica, massa:  $1,673 \cdot 10^{-27}$  kg

- Elettroni: carica negativa  $(-)$   $1,6022 \cdot 10^{-19}$  C, massa:  $(+)$   $9,1094 \cdot 10^{-31}$  kg

Il nucleo ha una raggio dell'ordine di grandezza di  $10^{-14} / 10^{-15}$ , contro un raggio dell'atomo totale di

$\approx 10^{-10}$ , anche detto 1 ångström (Å).

Il rapporto fra la massa del protone e la massa dell'elettrone è 1837, da questo e dal rapporto fra le dimensioni ne consegue che l'atomo ha la quasi totalità della massa concentrata in una piccola parte del suo volume totale: è+ in sostanza...vuoto.

La materia nucleare è densissima:  $10^8 \frac{\text{Mg}}{\text{cm}^3}$ !!!

**Numero atomico(Z)** = numero di protoni

**Numero di massa(A)** = numero di protoni(Z) e di neutroni(N)

da cui:  $A = Z + N$ , cioè  $N = A - Z$ . Nel caso dell'elemento X, si indicano i numeri atomici e di massa prima del simbolo a pedice ed apice:

${}^A_Z X$  [1]

Esempio:  ${}^{12}_6 C$  Carbonio 6-12, 6 Protoni nel nucleo, 12 nucleoni in tutto, cioè 6 neutroni.

La notazione [1] si usa anche per indicare le particelle subatomiche:

${}^1_1 p$  protone  ${}^0_{-1} e$  elettrone

Di ciascun elemento esistono vari *ISOTOPI*: differiscono fra loro per il numero di neutroni, quindi il numero Z è sempre lo stesso A invece cambia.

Esempi:  ${}^1_1 H$  (prozio)  ${}^2_1 H$  (deuterio)  ${}^3_1 H$  (trizio)

*Abbondanza percentuale e relativa*: definisce la quantità percentuale o relativa (percentuale / 100) dell'isotopo sulla totalità dell'elemento in natura. E' costante su tutto il pianeta.

### **Massa atomica relativa (peso atomico)**

Si è convenuto di chiamare Peso Atomico di un Atomo il rapporto fra la massa di un particolare atomo e quella di un atomo di riferimento. Per questo è più proprio chiamarlo *Massa Atomica Relativa*. In pratica il peso atomico di un elemento

non rappresenta la massa dell'atomo, ma un rapporto fra masse e quindi è unidimensionale.

Come atomo di riferimento, detto anche Unità di massa atomica, sono stati scelti nel tempo diversi atomi fino a quando, nel 1961, si convenne di assumere come Unità di Massa Atomica, o UMA (AMU in inglese):

$1 \text{ uma} = \frac{1}{12}$  della massa dell'isotopo  $^{12}_6\text{C}$  del carbonio, da cui ovviamente si ricava che il peso atomico del  $^{12}_6\text{C} = 12\text{uma}$

In uma, ecco le masse delle particelle sub atomiche *non all'interno dell'atomo*:

- Protone: 1,007276 uma
- Neutrone 1,008665 uma
- Elettrone: 0,000548 uma

Quando all'interno del nucleo, le masse di protone e neutrone diminuiscono perchè parte della massa si trasforma in energia.

Essendo le masse **uma** di protoni ed elettroni vicine a 1, otteniamo che il **numero di massa di un atomo è in prima approssimazione uguale al peso atomico dello stesso atomo espresso in uma.**

In una miscela di vari isotopi, il peso atomico sarà dato dalla sommatoria dei pesi atomici dei singoli isotopi moltiplicati per l'abbondanza relativa di ciascuno.

In una molecola, il peso atomico sarà dato dalla somma dei pesi atomici dei singoli atomi costituenti.

*Mole*: unità di misura della materia. Si intende una quantità di sostanza che contiene tante particelle quanti sono gli atomi contenuti in 12g di isotopo 12 del carbonio. Questi sono esattamente  $N_A = \text{numero di Avogadro} = 6,0022 \cdot 10^{23}$ .

in altri termini, una mole rappresenta una quantità di materia pari a  $N_A$  atomi (o molecole). Una mole di un elemento pesa in g il valore del peso atomico in uma del composto o atomo: 12 grammi di carbonio 12 rappresentano una mole, 15,999 grammi di ossigeno sono una mole e quindi contengono  $N_A$  molecole.

### **Radiazioni elettromagnetiche e spettri atomici**

- $\lambda$ : lunghezza d'onda, metri
- frequenza:  $c/\lambda$  (1/s, Hz)
- frequenza in numeri d'onda:  $1/\lambda$  (1/m)
- Suddivisione spettro:

(valori espressi in metri)

- - onde radio: fino a 1m
  - microonde: da  $10^{-2}$  a  $10^{-4}$
  - infrarosso: da  $10^{-4}$  a  $10^{-6}$
  - visibile: da  $10^{-6}$  a  $10^{-7}$
  - ultravioletto: da  $10^{-7}$  a  $10^{-9}$
  - raggi X: da  $10^{-9}$  a  $10^{-11}$
  - raggi gamma: da  $10^{-11}$

Ciascun elemento, eccitato, emette delle radiazioni specifiche. facendo passare tali radiazioni per una fenditura e un prisma, ciascuna frequenza viene deviata in modo proporzionale alla lambda e per ciascuna frequenza otteniamo una riga. L'insieme di queste righe caratteristiche dell'elemento è detto spettro atomico (o di emissione o a righe).

Se eccitiamo il gas H per via elettrica, otteniamo il seguente spettro atomico:

- - rosso: 659.28 nm (molto intensa)
  - azzurro: 468.1 nm
  - violetto: 434,05 e 410,10

Sperimentalmente, si vede che le frequenze delle righe spettrali dell'H gassoso rispettano la seguente relazione empirica:

$$\nu = R \left( \frac{1}{n_a^2} - \frac{1}{n_b^2} \right)$$

Dove  $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{Hz}$  mentre:

$n_a = 1$  per righe nell'ultravioletto

$n_a = 2$  per righe nel visibile

$n_a = 3$  per righe nell'infrarosso

$n_b : (n_a + 1 \leq n_b \leq \infty)$

#### *Ipotesi quantica di Planck*

Si sa che il colore emesso da un corpo riscaldato dipende dalla temperatura cui viene riscaldato. Il massimo dell'intensità della radiazione emessa passa da rosso a arancio, verde, azzurro e infine violetto. Cioè il picco dell'emissione si sposta via via verso frequenze maggiori mano a mano che aumenta la temperatura.

Tali radiazioni non vengono emesse con continuità, ma per quantità discretizzate detti *quanti*. L'energia di un quanto è legata alla sua frequenza attraverso la costante di Planck:

$$E = h \cdot \nu = h \left( \frac{c}{\lambda} \right) \text{ dove } h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

Einstein chiamò i *quanti* di energia *fotoni*.

Per *effetto fotoelettrico* si intende la capacità di un'onda elettromagnetica incidente di strappare elettroni da un metallo. tanto più alta sarà l'energia (e quindi la frequenza) dei fotoni incidenti, tanto maggiore sarà il numero degli elettroni (detti fotoelettroni) strappati.

Questa quantizzazione conferisce alla radiazione luminosa la doppia caratteristica di onda elettromagnetica e particella.

#### *Modello quantico dell'atomo di idrogeno di Bohr*

Bohr ha proposto questo modello che è importante in quanto giustificava la stabilità dell'atomo di H, composto da un protone e da un elettrone. Il precedente era quello di Rutherford, che aveva supposto che l'atomo di H fosse costituito da un nucleo più un elettrone in orbita circolare attorno al nucleo. ma secondo la teoria classica, una particella carica che ruota dovrebbe perdere energia e ricadere nel nucleo.

Bohr ipotizzò un atomo servendosi della teoria quantica di Planck, supponendo che l'elettrone si muova su orbite circolari appartenenti a gusci sferici, ad energia costante. Le orbite permesse sono solo quelle per cui:

$$m_e v_e r = n \frac{h}{2\pi} \text{ con } n \text{ intero...}$$

Dove ovviamente  $m_e v_e r$  è la quantità di moto dell'elettrone.

Bohr determinò anche il raggio di tali orbite, che dipende da  $n$  (detto *numero quantico*) elevato al quadrato:

$$r = a_0 n^2 \text{ con } a_0 = 0,529 \text{ \AA}$$

da cui ricavò anche l'energia totale dell'elettrone (come somma di cinetica e potenziale):

$$E = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18}}{n^2} \text{ J} = -\frac{E_0}{n^2}$$

Un elettrone che si trovi sull'orbita con  $n = 1$  si dice nello *stato fondamentale*.

Il segno meno viene dal fatto che è stato assegnato valore 0 all'Energia dell'elettrone libero, dunque l'energia dell'elettrone attirato dal nucleo sarà più piccola (più alta in valore assoluto). Variando la E con il quadrato di n, si avrà differenza alta fra livelli con n basso (es: fra 1 e 2), via via sempre più bassa per n più grandi. Quando l'atomo assorbe energia, un elettrone può passare dalla sua orbita di equilibrio ad un livello energetico più alto. Questo stato di cose però non è stabile e quindi ricade sulla sua orbita di energia inferiore e quindi perde energia. Perdendola, emette una radiazione.

Supponendo che l'elettrone passa da  $E_i$  a  $E_f$ , avremo una delta E:

$$\Delta E = 2,18 \cdot 10^{-18} \cdot \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

che verrà completamente emessa. Ora, visto che per la legge di plank l'energia emessa è quantizzata:

$$\Delta E = h\nu$$

otteniamo

$$\nu = 3,29 \cdot 10^{15} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \text{ identica alla sperimentale.}$$

Il modello atomico di Bohr ebbe vita breve, perchè non spiegava lo spettro atomico di atomi multi elettrone (in pratica, funzionava solo con l'idrogeno).

### *De Broglie*

Così come alle entità ondulatorie come il fotone era stata associata una natura particolare da Plank e Einstein, De Broglie intuì che poteva valere anche il **contrario**: si poteva associare una natura ondulatorie alle particelle sub atomiche.

Dalla legge di Plank e dalla nota legge di Einstein  $E = mc^2$ , si ottiene che per il fotone:

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

De broglie attribuì una relazione analoga all'elettrone:

$$\lambda_e = \frac{h_e}{m_e v_e}$$

Per gli elettroni liberi la velocità è di 6000 km/s, dunque a un elettrone libero si può associare un'onda con lunghezza d'onda di 1,2Å (nei raggi X). tale ipotesi fu poi provata da esperienze successive.

### *Principio di indeterminazione di Heisenberg*

$$\Delta x \Delta(mv) \geq \frac{h}{4\pi}$$

dove

$\Delta x$  è l'incertezza sulla posizione

$\Delta(mv)$  è l'incertezza sulla quantità di moto

da cui si ricava che per particelle con m piccola (elettroni), il prodotto delle incertezze sarà sempre molto grande. Questo fa perdere a tutti gli effetti validità al concetto di orbita e fa decadere il modello di Bohr. Ci vorrà quindi una nuova meccanica per descrivere il moto degli elettroni: la meccanica *ondulatoria* o *quantistica*.

### **Meccanica quantistica**

Si definisce **meccanica quantistica** o **meccanica ondulatoria** quella parte della fisica che descrive il comportamento ondulatorio delle particelle subatomiche.

Si basa sui seguenti principi:

- L'elettrone è un'onda
- L'elettrone deve (quindi) ubbidire ad un'equazione di propagazione

Schroedinger nel '27 propose un'equazione detto **d'onda** o di **Schroedinger** nella quale descrive l'elettrone come un'onda. In questa equazione compaiono valori noti:

- Massa dell'elettrone
- Carica dell'elettrone

e valori incogniti:

- $\psi$  = **funzione d'onda** o **orbitale**
- E = Energia Totale

$\psi$  è una soluzione dell'equazione d'onda che è anch'essa un'espressione matematica che descrive il comportamento dell'elettrone. Ad ogni soluzione ( $\psi$ ) è collegato un valore di energia totale.

La caratteristica fondamentale delle funzioni d'onda è che al quadrato è una densità

di probabilità:

$\psi^2$  = probabilità di trovare l'elettrone in un tale punto.

Nelle funzioni matematiche delle  $\psi$  e delle  $E$  compaiono numeri interi detti numeri *quantici* che sono correlati fra loro e sono:

- Numero quantico principale  $n$ : assume valori da 1 a infinito
- Numero quantico secondario  $l$ : da 0 a  $n-1$
- Numero quantico magnetico  $m_l$ :  $+l, +(l-1), \dots, -(l-1), -l$

Ogni terna dei numeri quantici definisce un *orbitale* o *stato quantico*. La notazione standard utilizza un numero e una lettera per identificare ciascun orbitale:

- Numero quantico principale indicato con un numero
- Numero quantico secondario indicato con una lettera:  $s$  ( $l=0$ ),  $p$  ( $l=1$ ),  $d$  ( $l=2$ ),  $f$  ( $l=3$ )

Stati quantici dell'idrogeno:

<b>n</b>	<b>l</b>	<b>m</b>	<b>Tipo di orbitali</b>	<b>n° orbitali</b>	<b>n° totale orbitali</b>
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	
2	1	-1, 0, +1	2p	3	4
3	0	0	3s	1	
3	1	-1, 0, +1	3p	3	
3	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	9
4	0	0	4s	1	
4	1	-1, 0, +1	4p	3	
4	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	
4	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	16

Da cui, il numero massimo di orbitali o stati quantici per un determinato  $n$  è  $n^2$ . Gli orbitali con uno stesso numero quantico principale si dicono appartengono allo stesso strato elettronico. Gli strati elettronici si indicano con  $K$  ( $n=1$ ),  $L$  ( $n=2$ ),  $M$  ( $n=3$ ),  $N$  ( $n=4$ ) etc etc.

Considerando ora le energie dei vari strati elettronici, si ha che:

$$E_n = \frac{-E_0}{n^2}$$

cioè l'energia dipende solo dal numero quantico principale. Orbitali diversi con la stessa energia si dicono **degeneri**. Per esempio quando  $n=2$  la *degenerazione* è 4, perchè si hanno 4 ( $=n^2$ ) orbitali alla stessa energia.



Espressione matematica dell'orbitale 1s, corrispondente alla terna quantica 100:

$$\psi_{100} = N(e^{-\frac{r}{a_0}}) = \frac{N}{e^{\frac{r}{a_0}}}$$

Dove

$$N = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3}\pi a_0^3}} \text{ è un fattore di normalizzazione}$$

$r$  è la distanza dell'elettrone dal nucleo

$a_0$  è il raggio della prima orbita di Bohr

$$\text{da cui: } \psi_{100} = N^2(e^{-\frac{2r}{a_0}}) = \frac{N^2}{e^{\frac{2r}{a_0}}}$$

Analizziamo allora la funzione Psi per la terna 100, appena scritta: la soluzione "100" dipende dalla sola distanza dell'elettrone dal nucleo, e dunque la funzione elevata al quadrato che rappresenta la probabilità dipenderà anch'essa dal solo quadrato della distanza. Dunque, le zone di probabilità sono dei gusci sferici, di conseguenza possiamo dire che **l'orbitale 1s ha simmetria sferica**. E' evidente che la funzione psi 100 ha un massimo per  $r=0$  mentre vale 0 per  $r \rightarrow \infty$ . Questo significa che i gusci di probabilità non si fermano improvvisamente, ma continuano da 0 all'infinito semplicemente con valore di probabilità decrescente. Solo tenendo conto di tutti gli infiniti gusci da 0 all'infinito si ha probabilità 100%, cioè solo integrando su  $r$  da 0 all'infinito si ottiene 1. Si definisce però una superficie limite di raggio  $r_0$  tale che:

$$\int_0^{r_0} \psi^2 dr = 90\%$$

e si dimostra che  $r_0 = a_0 = 0,529\text{Å}$ , cioè il raggio della prima orbita di Bohr.

Vi è quindi un'altra coincidenza con la teoria di Bohr, pur essendo il concetto espresso dalle due teorie completamente diverso.

Anche nell'orbitale 2s gli orbitali hanno simmetria sferica, questa volta con  $r = 5,2a_0$ . Generalizzando, **gli orbitali s indipendentemente dal numero quantico principale, hanno simmetria sferica** (e raggio maggiore al crescere di  $n$ ).

Nel caso di orbitali p, indipendentemente dal numero quantico principale, le superfici limiti hanno forma di "8" orientati sui tre assi, e a seconda dell'asse prendono i nomi di Px, Py, Pz. Ognuno di questi possiede una **superficie nodale**, che è per definizione una **superficie sulla quale non si possono trovare elettroni**. Per il Pz la superficie nodale sarà il piano xy e similare per gli altri.

Vadiamo dunque il significato dei numeri quantici:

- il **numero quantico principale n** è in relazione con le dimensioni e l'energia dell'orbitale
- il **numero quantico secondario l** è in relazione con la forma dell'orbitale

- il **numero quantico magnetico m** è in relazione con l'orientazione dell'orbitale:
  - $l = 0, m = 0$  nessuna orientazione (solo orbitale s, sferico)
  - $l = 1, m = -1, 0, +1$  3 orbitali degeneri in 3 direzioni preferenziali
  - $l = 2, m = -2, -1, 0, +1, +2$  5 orbitali degeneri in 5 direzioni preferenziali

oltre alla terna di numeri quantici principale, secondario e magnetico, l'elettrone è caratterizzato anche da un quarto numero quantico detto **numero quantico di spin**, correlato al fatto che dati sperimentali supportano la tesi che l'elettrone abbia come analogo classico una sfera che ruota su se stessa generando un campo magnetico con un polo N e un polo S. Lo spin elettronico è quantizzato ed i valori che può assumere sono  $+1/2$  e  $-1/2$  a seconda del verso di rotazione orario o anti-orario.

### *Atomi polielettronici*

In questi casi si sono ottenute delle funzioni  $\psi$  approssimate ottenute per via numerica. In queste soluzioni si nota la presenza di numeri quantici fra loro correlati esattamente come nel caso dell'Idrogeno. La sostanziale differenza negli atomi poli elettronici è che in questi l'energia non dipende solo dal numero quantico principale, ma anche del secondario: al crescere di  $l$  sale l'energia. E' ancora vero cmq che all'aumentare del numero quantico principale i livelli energetici si avvicinano all'aumentare di  $r$ .

Si osserva inoltre che la funzione probabilità non presenta la stessa sequenza di ordine dell'energia: una scala energetica porrebbe gli orbitali in quest'ordine energetico: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d etc etc. mentre la funzione di probabilità  $\psi^2$  per esempio è maggiore per l'orbitale 4s che per il 3d, o in generale è maggiore per gli orbitali s di un livello energetico rispetto ai d del livello energetico precedente.

### *Principio di esclusione di Pauli*

**Non più di 2 elettroni possono essere descritti dalla stessa funzione principale** In altri termini, a ciascuna terna di numeri quantici si associano al più 2 elettroni, e questi due avranno numero quantico di spin opposto. I due elettroni nello stesso orbitale si dicono **accoppiati** e si indicano con due frecce, una verso l'alto e una verso il basso.

### *Principio di Hund o della massima molteplicità*

**Negli atomi polielettronici gli orbitali degeneri vengono dapprima occupati tutti singolarmente da elettroni con spin parallelo (condizione che soddisfa**

**la minima energia) e solo successivamente da altri elettroni che si accoppiano con i precedenti.**

Esempio: *disponiamo 2 elettroni in orbitali degeneri di tipo p*. Sappiamo che gli orbitali di tipo p sono 3, quindi 2 di questi orbitali verranno occupati da elettroni con spin parallelo, il terzo resterà vuoto:



Se ne dobbiamo disporre 3:



Se ne dobbiamo disporre 4, ovviamente sarà:



### *Principio dell'Aufbau*

Gli elettroni in atomi polielettronici nello stato fondamentale (non eccitati) vanno ad occupare gli orbitali secondo l'ordine di riempimento ubbidendo al principio di esclusione di Pauli e al principio di Hund. Tale ordine di riempimento è riassunto nel seguente diagramma:

n	l			
	0	1	2	3
1	1s			
2	2s	2p		
3	3s	3p	3d	
4	4s	4p	4d	4f
5	5s	5p	5d	5f
6	6s	6p	6d	
7	7s	7p		

Quindi: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s e così via.

## Tavola periodica degli Elementi

The image shows a standard periodic table of elements. It is color-coded by groups: alkali metals (blue), alkaline earth metals (orange), transition metals (green), post-transition metals (red), metalloids (purple), non-metals (yellow), and noble gases (grey). A legend in the top right corner explains these color codes. The table includes element symbols, atomic numbers, and names. The title 'TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI' is prominently displayed at the top center.

La TPDE riporta gli elementi in ordine successivo di numero atomico, che aumenta nell'ambito della riga. E' divisa in righe chiamate *periodi* e in colonne chiamati *gruppi*.

Il **Primo periodo** comprende l'elemento idrogeno e l'elemento elio. Applicando l'Aufbau, vediamo le due configurazioni elettroniche:

Idrogeno(**H**):  $Z = 1$ , 1 elettrone, orbitale 1s (1 elettrone) Elio(**He**):  $Z = 2$ , 2 elettroni, orbitale 2s (2 elettroni accoppiati, a spin antiparallelo)

L'elio viene chiamato *gas nobile* in quanto si chiude con un orbitale completo, particolarmente stabile.

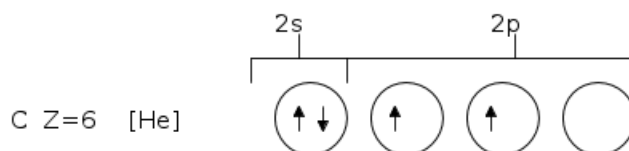
Il **secondo periodo** comprende: Litio (**Li**):  $Z = 3$ , 3 elettroni, 2 nell'orbitale 1s indicato anche come [He], 1 elettrone in 2s

Berillio (**Be**):  $Z = 4$ , 4 elettroni, [He], e elettroni accoppiati in 2s

Boro (**B**):  $Z = 5$ , 5 elettroni, [He] + 2x2s(accoppiati) + 1x2p

Carbonio (**C**):  $Z = 6$ , 6 elettroni, [He], 2x2s(accoppiati), 2x2p a spin parallelo

Graficamente (esempio del carbonio, gli altri *uguali*):



Continuando:

Azoto (**N**):  $Z = 7$ , [He], 2x2s(accoppiati), 3x2p a spin parallelo

Ossigeno (**O**):  $Z = 8$ , [He], 2x2s(accoppiati), 4x2p (2 accoppiati 2 a spin parallelo)

Fluoro (**F**):  $Z = 9$ , [He], 2x2s(accoppiati), 5x2p (4 accoppiati e 1 a spin parallelo)

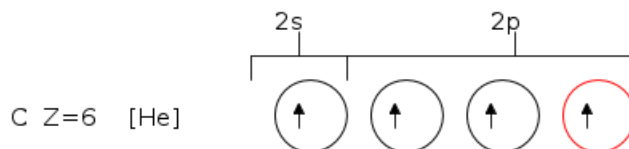
Neon (**Ne**):  $Z = 10$ , [He], 6x2p (tutti accoppiati).

Si noti che il Neon, che termina la seconda riga, ha numero atomico esattamente 8 più del precedente gas nobile, l'He, e 8 sono i possibili elettroni nell'orbitale a numero quantico principale 2 (2 in 2s e 6 in 2p). Dunque, anche il neon è un gas nobile e quindi in generale tutti gli elementi dell'ultima riga lo sono, con numero atomico sempre uguale al numero di orbitali possibili in modo da completare tutti i livelli energetici disponibili.

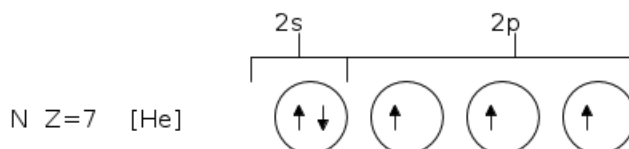
Chiamiamo **elettroni di valenza** gli elettroni in più rispetto alla precedente configurazione stabile: Litio 1 elettrone di valenza, Berillio 2, Boro 3, Carbonio 4 etc etc fino al Neon che ne avrebbe 8, ma la valenza è una quantità che è correlata a quanti elettroni ha un particolare elemento disponibili per una reazione. Un elemento come il neon si dice aver raggiunto una configurazione ad **ottetto**, cioè con lo strato elettronico esterno completo, che è particolarmente stabile, e quindi si dice che la sua valenza è 0.

La capacità di combinazione di un elemento, dipende dal numero di elettroni spaiati. Dunque sembrerebbe che la capacità di combinazione per esempio del berillio dovrebbe essere zero, del carbonio 2...ma sappiamo in realtà essere 4. Questo si spiega supponendo che durante la reazione gli elettroni accoppiati si disaccoppino e

uno dei due venga *promosso* all'orbitale con numero quantico secondario successivo. Per esempio, il be normalmente ha  $2x2s$  accoppiati +  $1x2p$ , in reazione diventano  $1x2s + 2x2p$  a spin parallelo, cioè capacità di combinazione di 3 (e quindi uguale numericamente alla valenza). Un atomo in questo stato si dice **eccitato**. Questo stesso discorso si può fare anche per il C, che quindi una volta eccitato passerebbe alla configurazione:



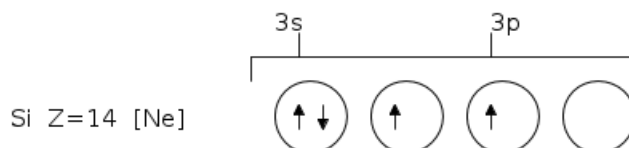
mettendo dunque a disposizione 4 elettroni per la combinazione. Questo è possibile a causa della bassa differenza di energia fra orbitali a numero quantico secondario differente. Se ora analizziamo la situazione dell'Azoto (N):



vediamo che questo non è possibile, perchè il primo orbitale *libero* sarebbe a numero quantico principale differente.

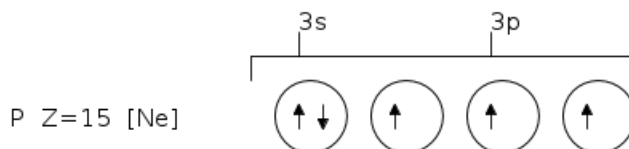
Il **terzo periodo**: Sodio(**Na**), Magnesio(**Mg**), Alluminio (**Al**), Silicio (Si), Fosforo (P), Zolfo (**S**), Cloro (**Cl**), Argon (**Ar**).

La configurazione elettronica di questi elementi si scrive *a patire* da quella del gas nobile più vicino, cioè da quella dell'elemento finale del periodo precedente, il Neon (Ne). Se per esempio prendiamo il Silicio:

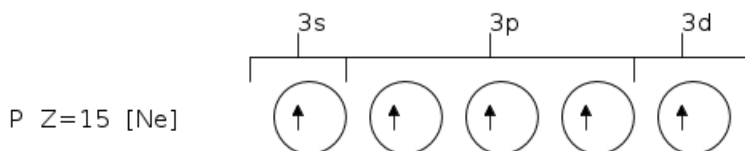


Che si può dire anche:  $3s^2 3p^2$ , tenendo conto che gli elettroni saranno accoppiati a spin antiparallelo tutte le volte che non c'è spazio per porli in parallelo. Il Si avrà quindi un numero di valenza 4. Come si vede facendo lo stesso diagramma per tutti gli altri, la configurazione elettronica esterna si ripropone, quindi si può dire che la configurazione elettronica esterna è una funzione periodica del numero atomico. L'ultimo del periodo, l'Argon, ha raggiunto l'ottetto e quindi è in una configurazione stabile. Lo stato quantico con numero quantico principale 3 consente gli orbitali di tipo d, quindi anche P, S e Cl hanno la possibilità di passare in uno stato eccitato *promuovendo* elettroni dall'orbitale di tipo p a quello di tipo d:

Fosforo non eccitato:



**Fosforo eccitato:**



Questo è ovviamente possibile perchè esiste un orbitale a energia maggiore per il quale si ha lo stesso stato quantico (identificato dal numero quantico 3).

**Quarto periodo** Presenta una riga molto lunga che inizia con l'elemento **Potassio** (Z=19). Vediamo la configurazione elettronica di tutti, ricordando che nel periodo 4 gli elementi partono dalla configurazione dell'ultimo elemento del periodo 3, e quindi dell'Argon, e che dall'Aufbau l'ordine di riempimento è  $4s \rightarrow 3d$ , ma notando alcune discrepanze:

	Z		3d	4s	4p
Potassio(K)	19	[Ar]		↑	
Calcio(Ca)	20	[Ar]		↑↓	
Scandio(Sc)	21	[Ar]	↑	↑↓	
Titanio(Ti)	22	[Ar]	↑ ↑	↑↓	
Vanadio(V)	23	[Ar]	↑ ↑ ↑	↑↓	
Cromo(Cr)	24	[Ar]	↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑	
Manganese(Mn)	25	[Ar]	↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑↓	
Ferro(Fe)	26	[Ar]	↑↓ ↑ ↑ ↑ ↑	↑↓	
Cobalto(Co)	27	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑	↑↓	
Nichel(Ni)	28	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	↑↓	
Rame(Cu)	29	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑	↑	
Zinco(Zn)	30	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	
Gallio(Ga)	31	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑
Germanio(Ge)	32	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↑
Arsenico(As)	33	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑
Selenio(Se)	34	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑
Bromo(Br)	35	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓
Criptone(Kr)	36	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓

Le due frecce rosse indicano la configurazione elettronica di Cromo e Rame, perchè non rispetta quanto ci si aspetterebbe dall'Aufbau. La spiegazione di questo è data dal principio di minima energia: la configurazione che gli atomi assumono è più stabile di quella prevista. In linea generale si possono pensare le due regole:

- la configurazione elettronica che prevede di avere tutti gli orbitali semi-pieni è più



stabile di una in cui vi sia un orbitale pieno e uno vuoto (ovviamente nello stesso stato quantico).

- la configurazione con uno stato quantico secondario a energia più bassa (numero quantico secondario più basso) pieno e uno a energia più alta semi pieno, è più stabile di una con lo stato quantico a energia maggiore pieno e l'altro con un orbitale semipieno, indipendentemente dall'ordine della probabilità  $\psi$ .

Estratto da "<http://www.electroyou.it/mediawiki/index.php?title=UsersPages:Obiuan:n-a-2>"