

NUMERI QUANTICI

Le autofunzioni sono caratterizzate da tre parametri chiamati **NUMERI QUANTICI** e sono completamente definite dai loro valori:

- **n** : numero quantico principale
- **l** : numero quantico secondario
- **m** : numero quantico magnetico

I **numeri quantici** possono assumere solamente i valori che rispettano le seguenti regole:


$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

NUMERI QUANTICI

Ogni autofunzione definita da una data terna di valori di numeri quantici n, l, m rappresenta un ORBITALE

➔ Numero quantico principale: n ($= 1, \dots, \infty$)

Definisce l' **ENERGIA** e la **DIMENSIONE** dell'orbitale

➔ Numero quantico secondario o azimutale : l ($= 0, 1, \dots, n-1$)

Indica il momento angolare dell'elettrone e definisce la **FORMA** dell'orbitale

➔ Numero quantico magnetico: m ($= -l, \dots, 0, \dots, +l$)

Determina l' **ORIENTAMENTO SPAZIALE** dell'orbitale

NUMERI QUANTICI

I diversi tipi di ORBITALI vengono designati usando un **NUMERO** e una **LETTERA**

➔ Il **NUMERO** definisce il valore di **n**

➔ La **LETTERA** definisce il valore **l**

l = 0 vengono indicati con **s** (sharp)

l = 1 vengono indicati con **p** (principal)

l = 2 vengono indicati con **d** (diffuse)

l = 3 vengono indicati con **f** (fundamental)

n **l** **m**

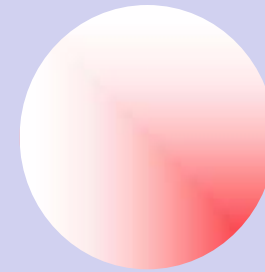
1 **0** **0**

un orbitale 1s

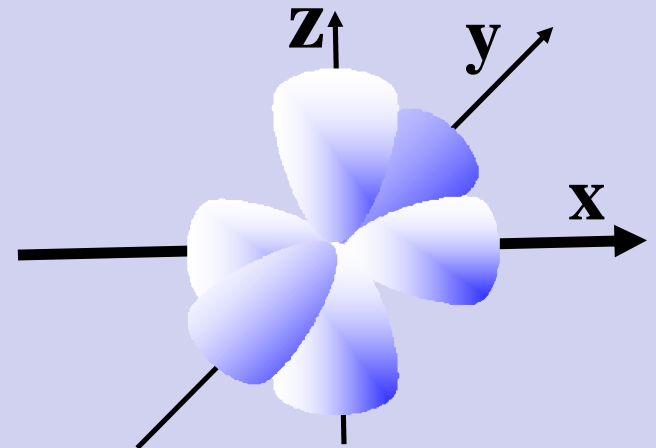


2 $\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{array} \right.$ **0**
1 $\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{+1} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{-1} \end{array} \right.$

un orbitale 2s



tre orbitali 2p



n **l** **m**

3 {

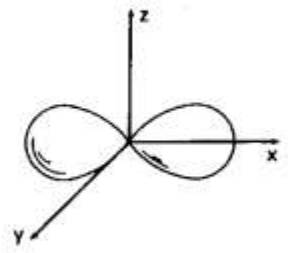
0 **0**

1 { **+1**
0
-1

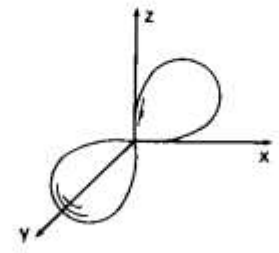
2 { **+2**
+1
0
-1
-2



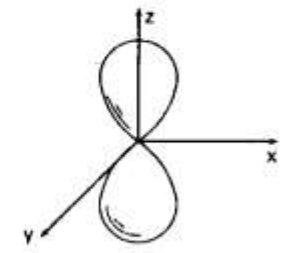
3s



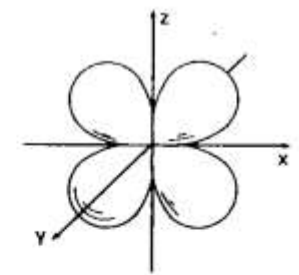
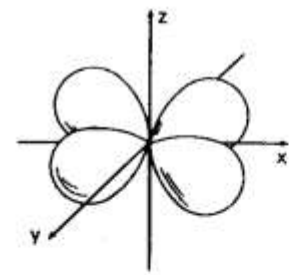
3px



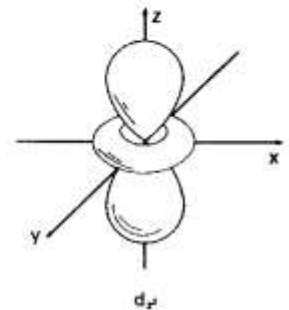
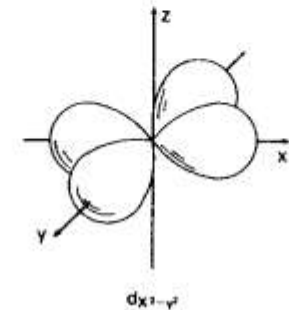
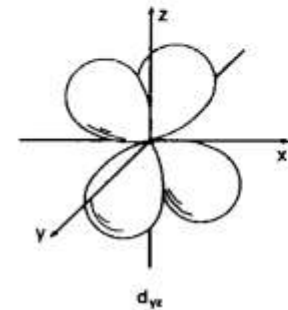
3py



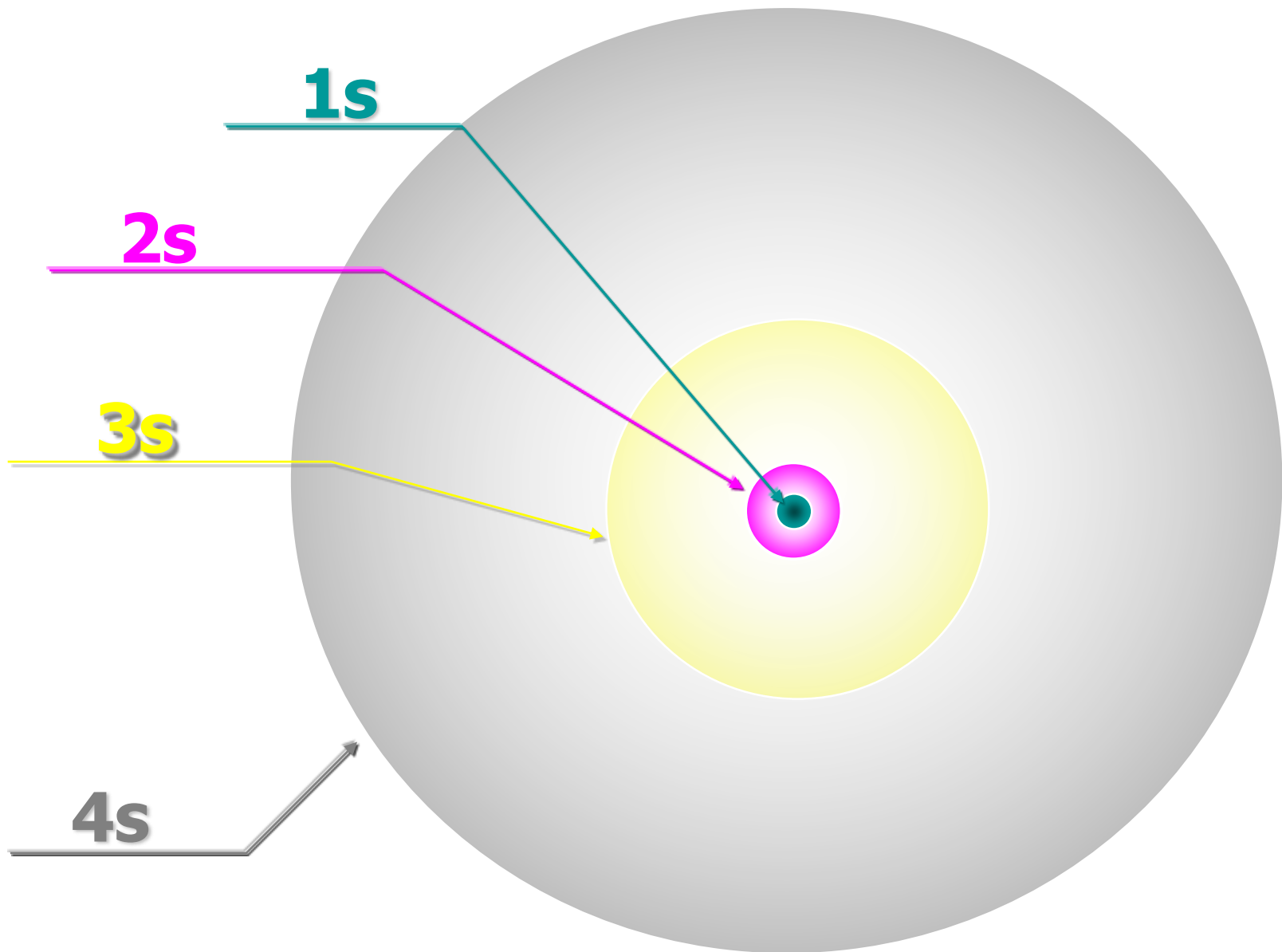
3pz



cinque orbitali 3d



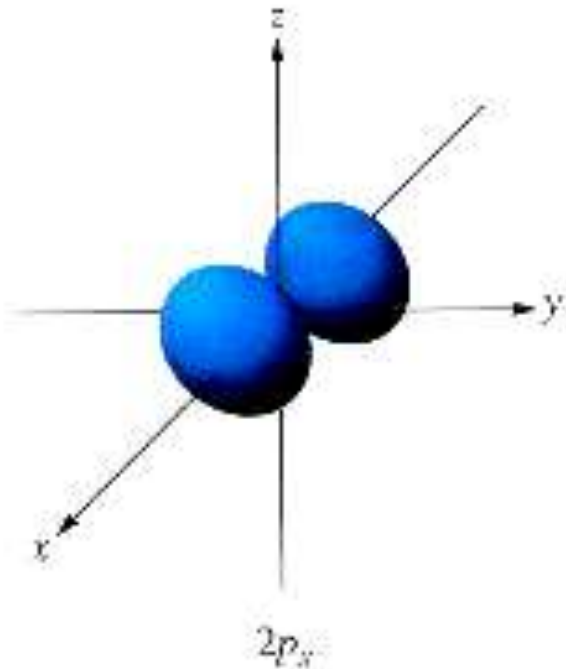
$l = 0$ (orbitali s)



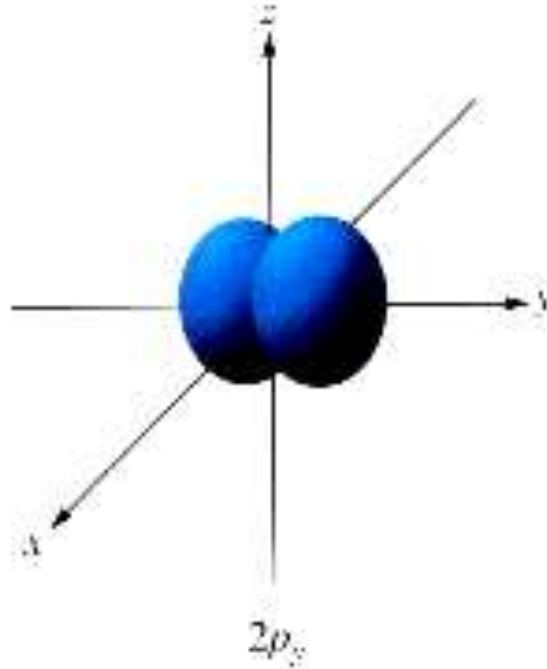
Gli orbitali che hanno valore di $l = 1$ si chiamano **orbitali p**.

Per $l = 1$, il numero quantico magnetico m può assumere i valori **+1, 0, -1**

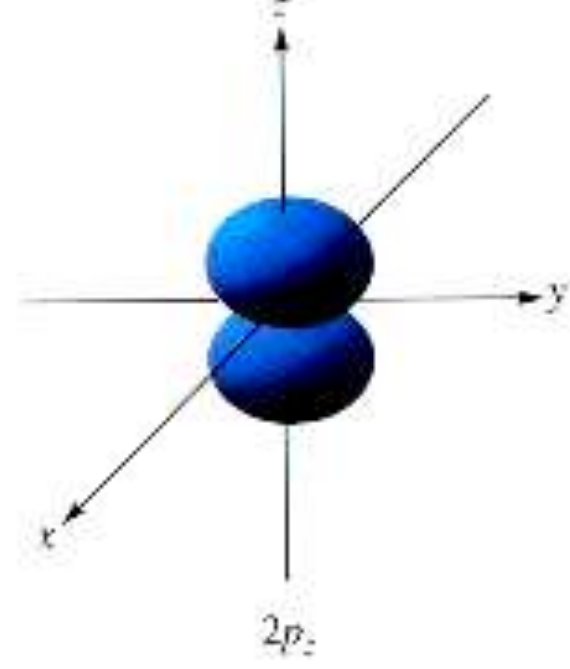
$m = +1$



$m = 0$



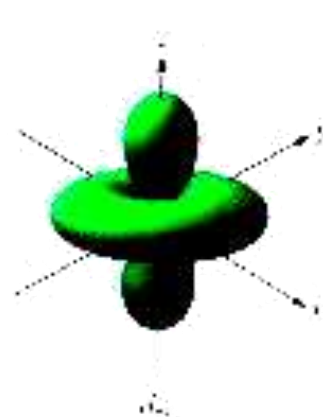
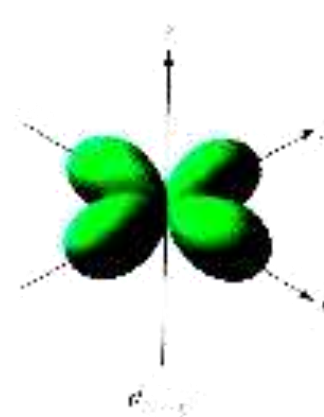
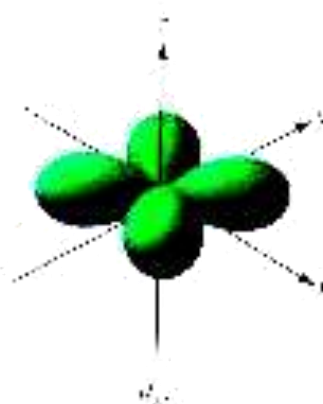
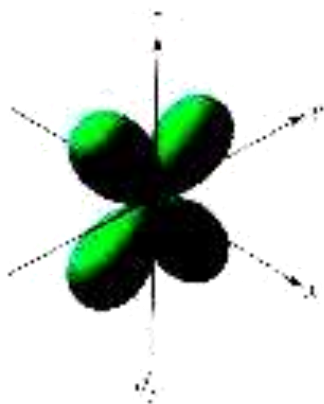
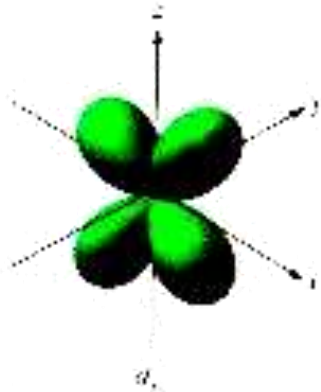
$m = -1$



Gli orbitali che hanno valore di $l = 2$
si chiamano **orbitali d**

Per $l = 2$ possono aversi 5 valori di m :

$\left. \begin{array}{c} +2 \\ +1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{array} \right\}$



Per $l = 3$ si hanno 7 orbitali f
($m = \pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$)

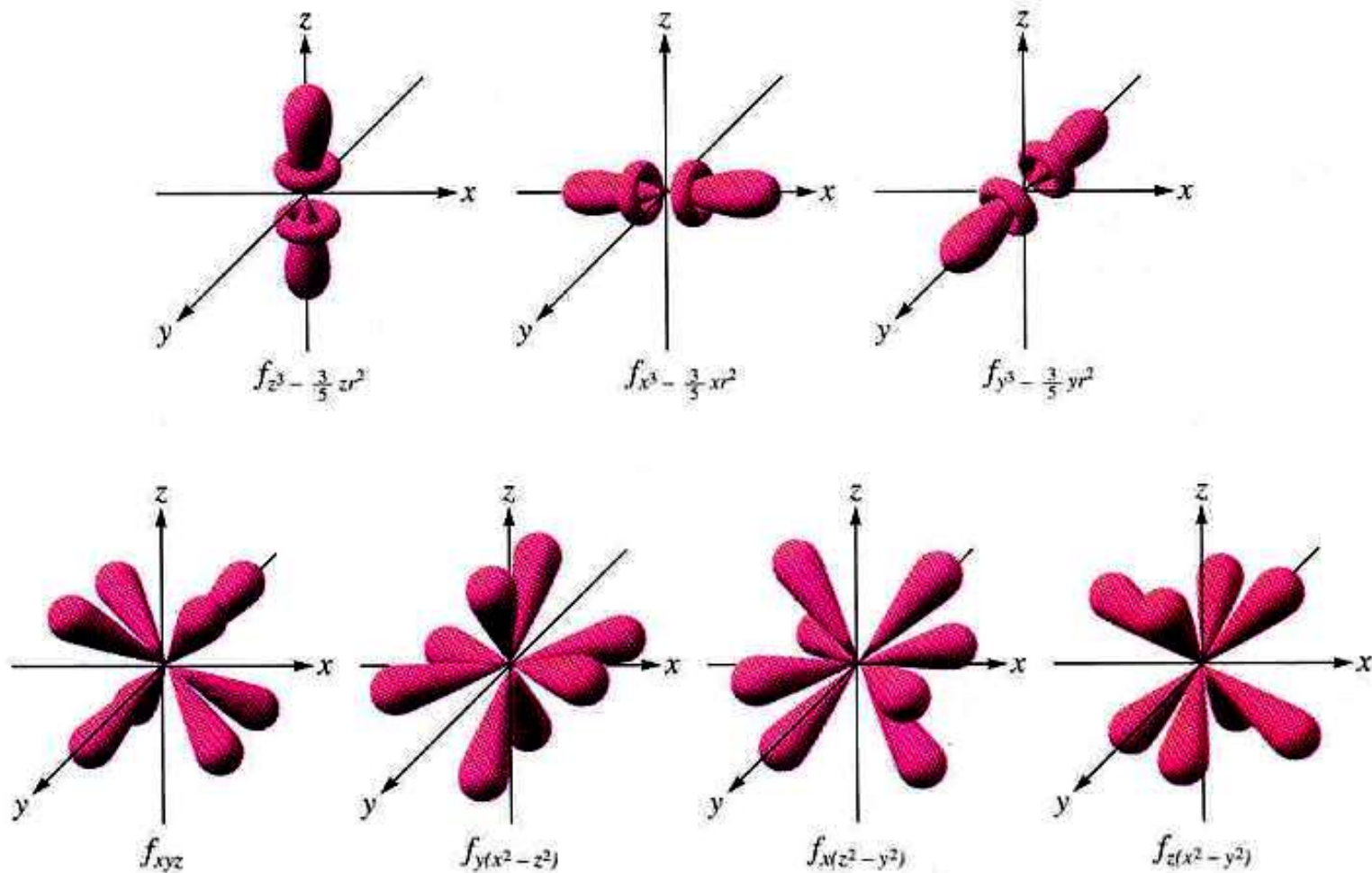


TABELLA 1.1 VALORI DEI NUMERI QUANTICI n, l, m

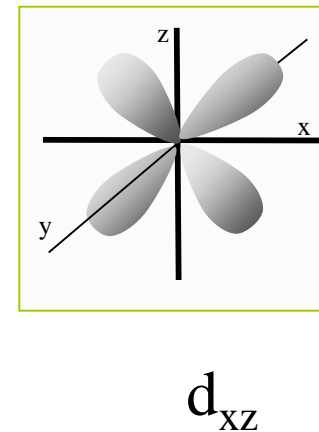
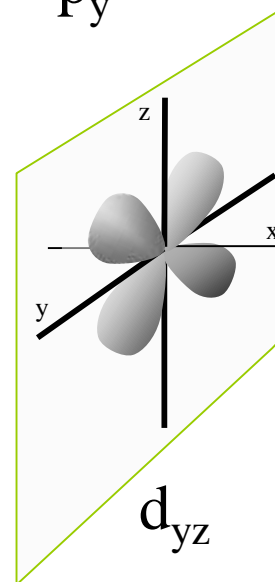
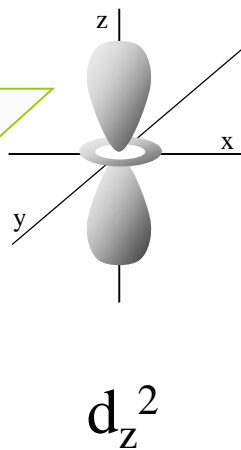
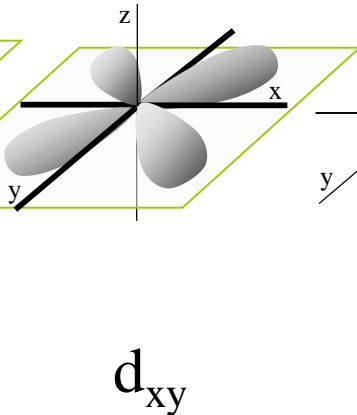
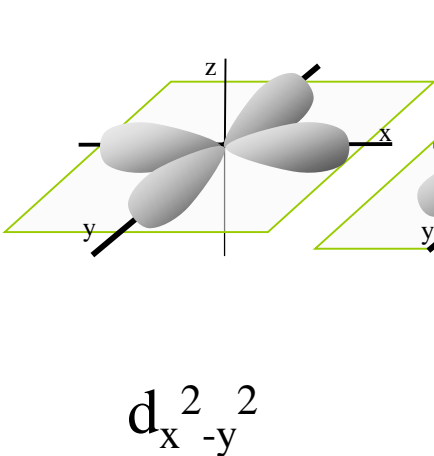
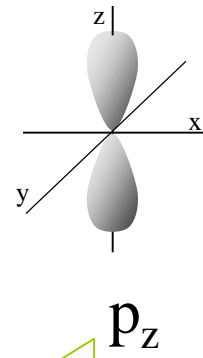
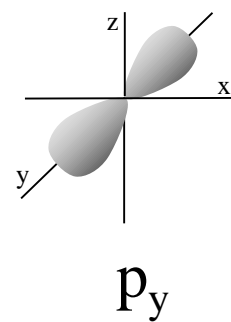
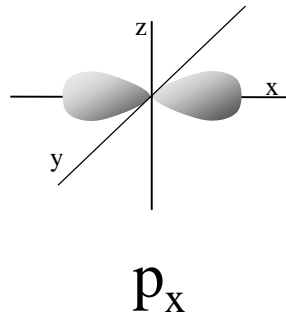
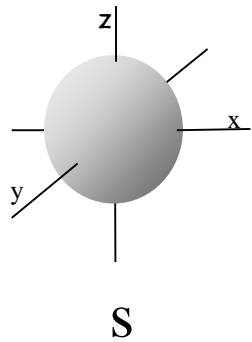
n	l	m	Orbitali		
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	un orbitale 1s	
		0	$\Psi_{2,0,0}$	un orbitale 2s	
2	1	-1	$\Psi_{2,1,-1}$	tre orbitali degeneri 2p	
		0	$\Psi_{2,1,0}$		
		+1	$\Psi_{2,1,+1}$		
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	un orbitale 3s	
		1	-1	$\Psi_{3,1,-1}$	tre orbitali degeneri 3p
			0	$\Psi_{3,1,0}$	
	+1	$\Psi_{3,1,+1}$			
	2	2	-2	$\Psi_{3,2,-2}$	cinque orbitali degeneri 3d
			-1	$\Psi_{3,2,-1}$	
			0	$\Psi_{3,2,0}$	
			+1	$\Psi_{3,2,+1}$	
			+2	$\Psi_{3,2,+2}$	
	4	0	0	$\Psi_{4,0,0}$	un orbitale 4s
1			-1	$\Psi_{4,1,-1}$	tre orbitali degeneri 4p
			0	$\Psi_{4,1,0}$	
		+1	$\Psi_{4,1,+1}$		
2		2	-2	$\Psi_{4,2,-2}$	cinque orbitali degeneri 4d
			-1	$\Psi_{4,2,-1}$	
			0	$\Psi_{4,2,0}$	
			+1	$\Psi_{4,2,+1}$	
			+2	$\Psi_{4,2,+2}$	
3		3	-3	$\Psi_{4,3,-3}$	sette orbitali degeneri 4f
			-2	$\Psi_{4,3,-2}$	
			-1	$\Psi_{4,3,-1}$	
			0	$\Psi_{4,3,0}$	
			+1	$\Psi_{4,3,+1}$	
	+2		$\Psi_{4,3,+2}$		
	+3		$\Psi_{4,3,+3}$		

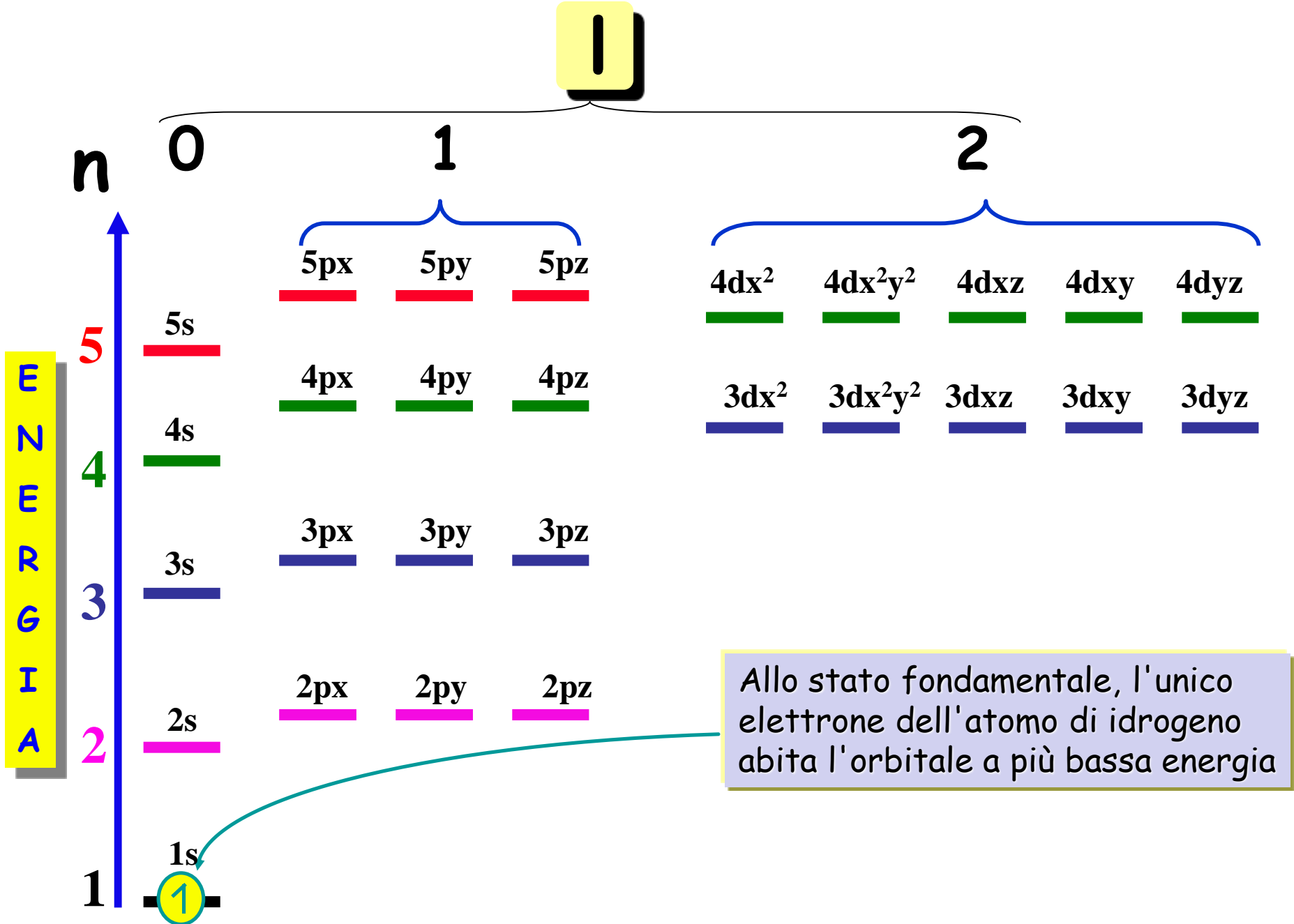
idrogeno (1 protone + 1 elettrone)

Gli orbitali disponibili per ospitare l'unico elettrone sono tanti:

$1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z, 3s, 3p_x, 3p_y, 3p_z, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{xz}, 3d_{z^2}, 3d_{yz}, 3d_{xy}, 4s, 4p_x, 4p_y, 4p_z, 4d_{x^2-y^2}, 4d_{xz}, \dots$

In quale orbitale va messo questo elettrone ?





Allo stato fondamentale, l'unico elettrone dell'atomo di idrogeno abita l'orbitale a più bassa energia

Gli elettroni degli atomi multielettronici occupano orbitali simili a quelli dell'idrogeno. Tuttavia l'energia di tali orbitali non è la stessa degli orbitali dell'atomo di idrogeno perché:

- il nucleo di un atomo multielettronico ha una carica maggiore e tale carica attrae gli elettroni più intensamente, abbassandone l'energia.
- gli elettroni, però, si respingono a vicenda e tale repulsione ridimensiona l'attrazione nucleare e tende ad elevare l'energia degli orbitali → le repulsioni interelettroniche innalzano l'energia degli orbitali $2p$ rispetto a quella del $2s$.

I tre orbitali $3p$ si collocano più in alto del $3s$ e i cinque orbitali $3d$ ancora sopra.

AUFBAU

È la costruzione ideale degli atomi, fatta disponendo nel nucleo i protoni e negli orbitali un ugual numero di elettroni.



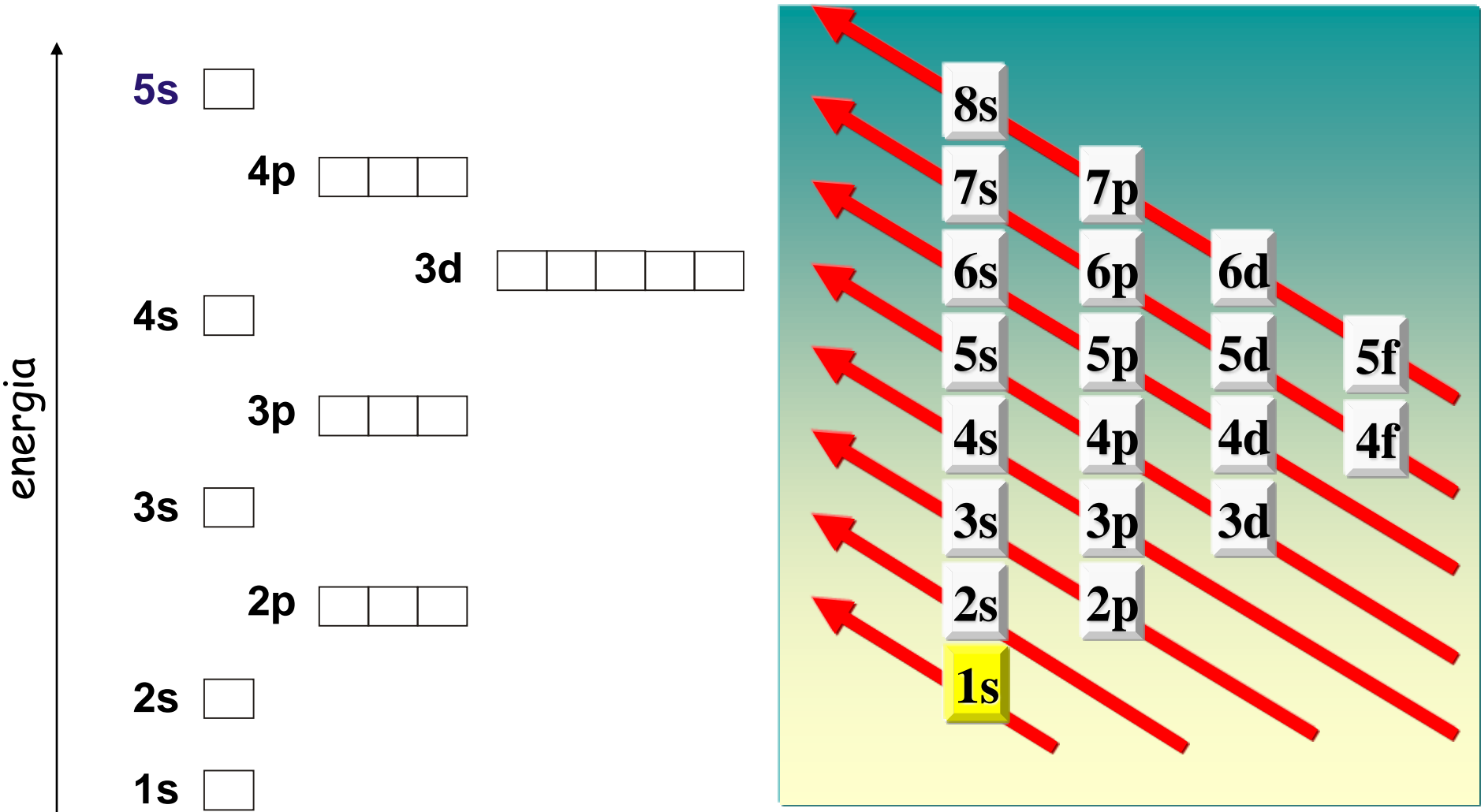
AUFBAU

Il termine AUFBAU significa in tedesco "costruzione" e rappresenta per noi la costruzione della configurazione elettronica degli atomi, ovvero la distribuzione degli elettroni nei vari livelli e sottolivelli energetici di un atomo

Per scrivere correttamente la configurazione elettronica occorre conoscere l'ordine con cui sono riempiti i vari orbitali

AUFBAU

Il riempimento degli orbitali procede con la sequenza indicata a lato (seguendo dal basso le frecce).



Gli orbitali s vengono riempiti prima degli orbitali d ($4s$ prima dei $3d$ e $5s$ prima dei $4p$) perchè anche la forma dell'orbitale (determinata dal valore di l) contribuisce al contenuto energetico dell'orbitale.....
è energeticamente meno dispendioso riempire l'orbitale $4s$ rispetto ad un orbitale $3p$!!!!!!

AUFBAU

Inoltre...

-l'ordine di riempimento è basato su **tre regole**:

Regole:

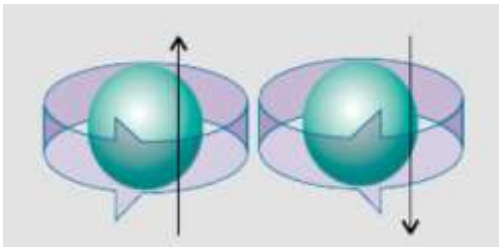
1. L'elettrone occupa l'orbitale a più bassa energia disponibile
2. Principio di Pauli: un orbitale può essere vuoto oppure abitato da uno o, al massimo, da due elettroni. Due elettroni che occupano lo stesso orbitale hanno spin antiparallelo.
3. Principio di Hund: il riempimento di un orbitale degenere si ha soltanto se gli altri orbitali degeneri sono già occupati da un elettrone.

AUFBAU

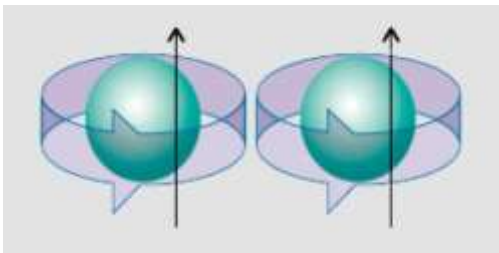
Principio di esclusione di Pauli

In un atomo non possono esistere 2 elettroni con tutti i numeri quantici uguali; perciò **nello stesso orbitale** possono esserci 2 soli elettroni purchè con m_s , **momento di spin, diverso**

m_s , numero quantico di spin: senso di rotazione dell' e^- intorno al proprio asse ($m_s = +1/2$; $m_s = -1/2$)



Valori opposti di m_s \longrightarrow SPIN ANTIPARALLELI



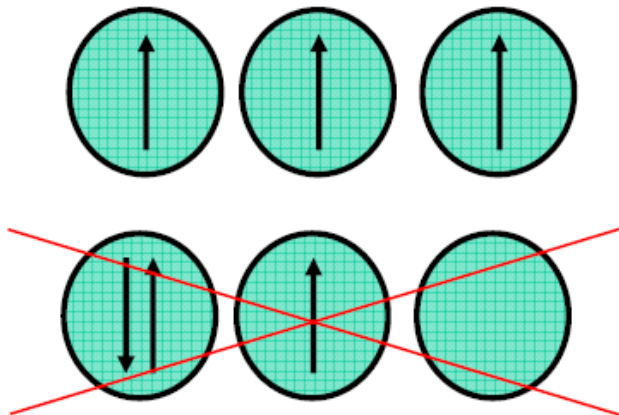
Valori uguali di m_s \longrightarrow SPIN PARALLELI

AUFBAU

Regola di HUND (max molteplicità di spin)

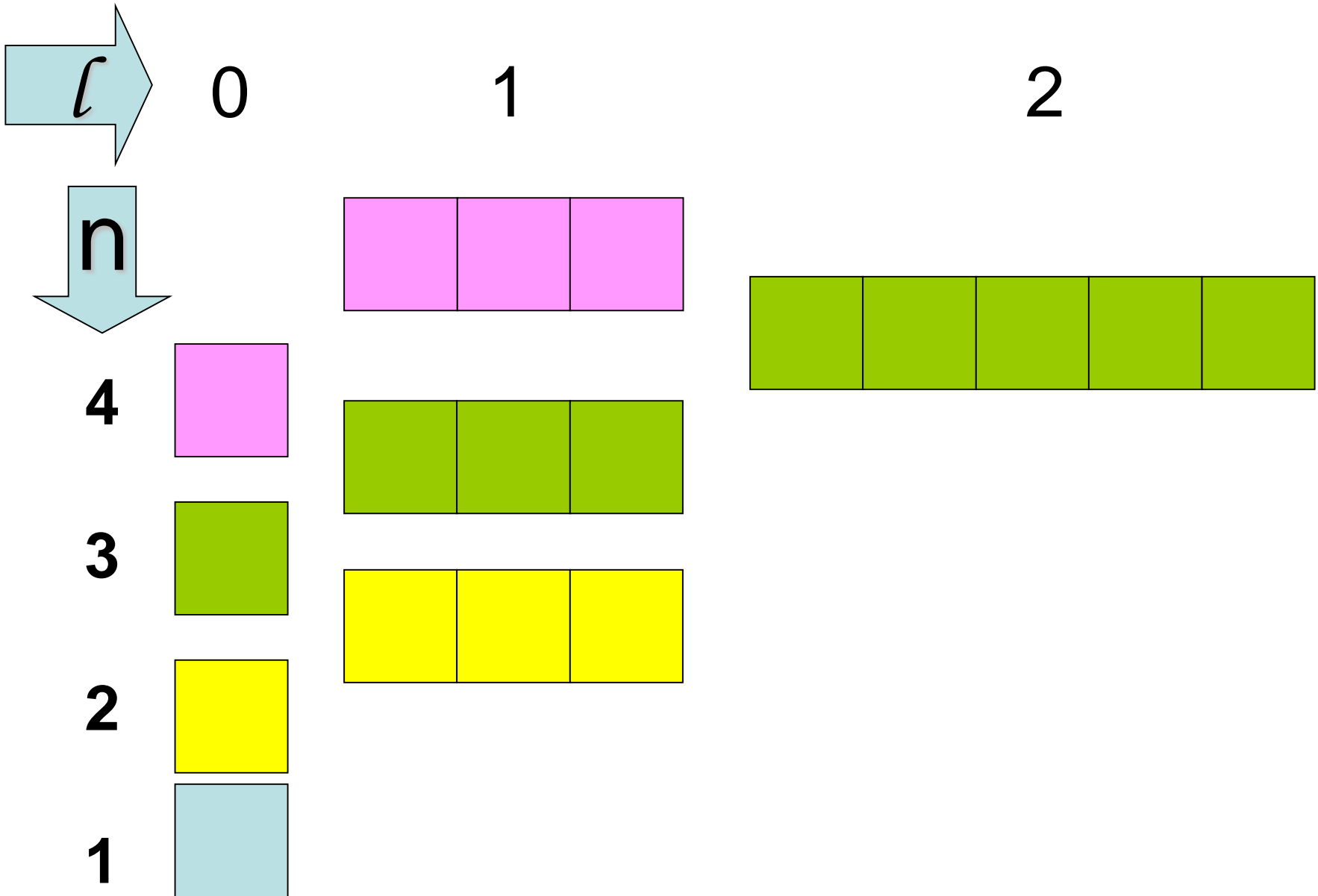
Quando due o più elettroni hanno a disposizione orbitali degeneri, essi tendono ad occuparne il massimo numero possibili, disponendosi a spin paralleli

3 elettroni in 3 orbitali p



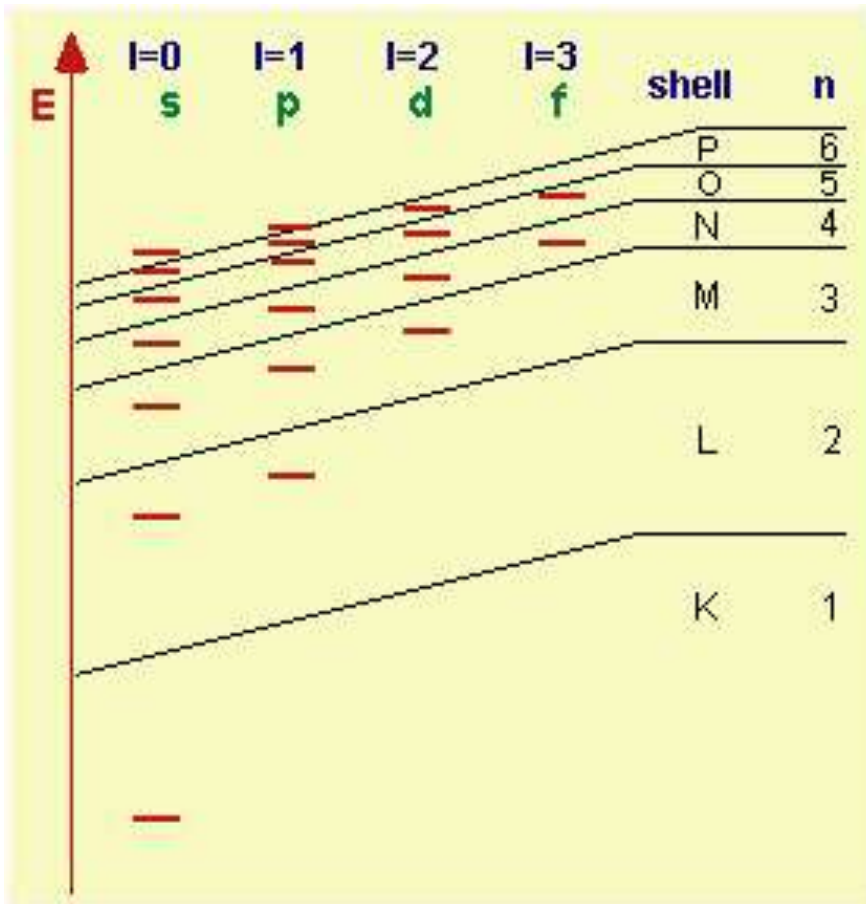
Repulsioni
elettrostatiche
maggiori

AUFBAU



AUFBAU

Seguendo le regole indicate e conoscendo la sequenza di energia per gli orbitali indicata in figura si può sapere per ogni atomo quali sono quelli occupati e si può procedere all'AUFBAU, cioè al riempimento progressivo degli orbitali con gli elettroni



n definisce il cosiddetto "guscio" o "shell"

($n=1$ guscio K, $n=2$ guscio L...)

Guscio K \rightarrow n. max di elettroni 2

Guscio L \rightarrow n. max di elettroni 8

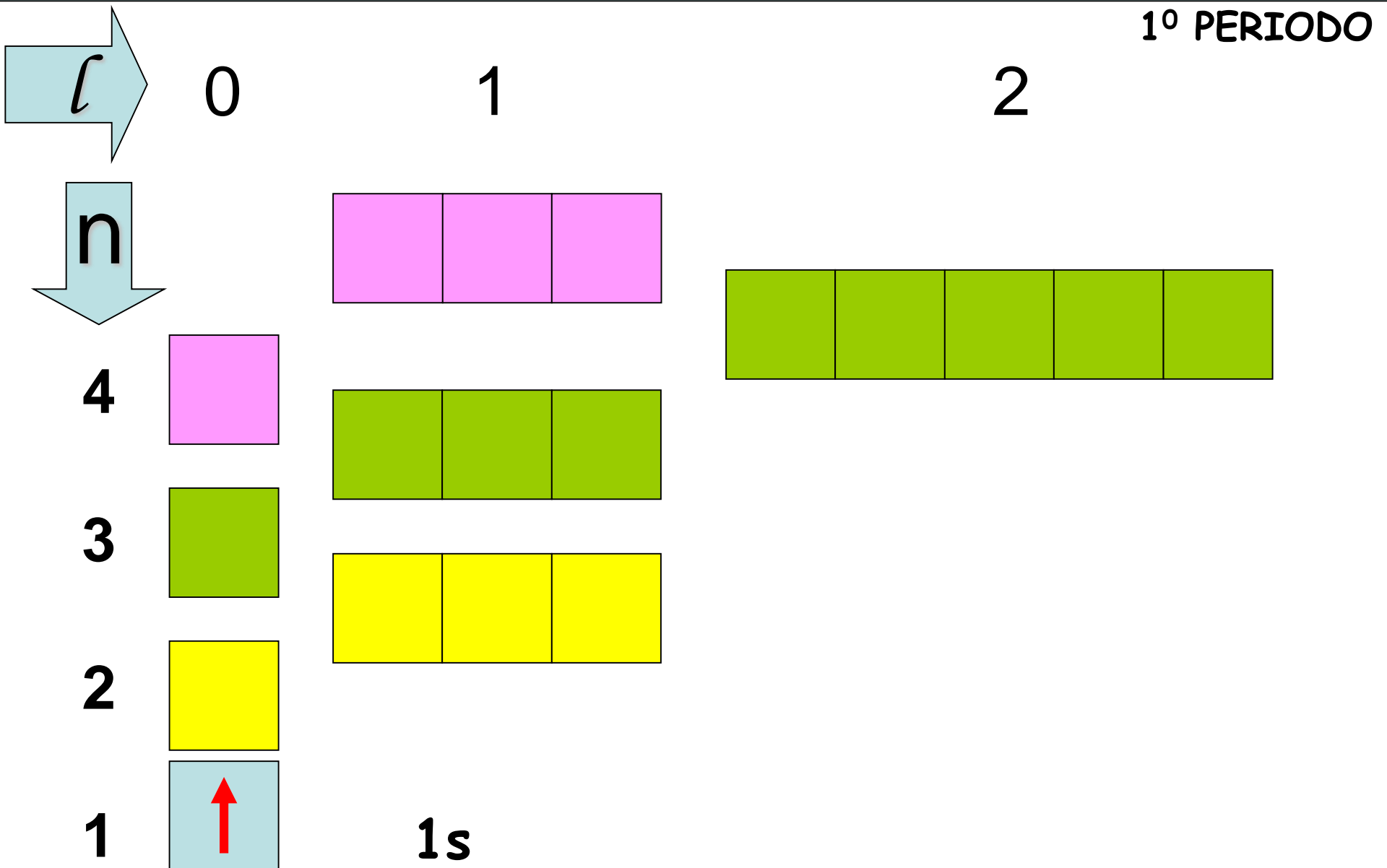
Guscio M \rightarrow n. max di elettroni 18

$Z = 1$

Idrogeno

simbolo: H

1^o PERIODO

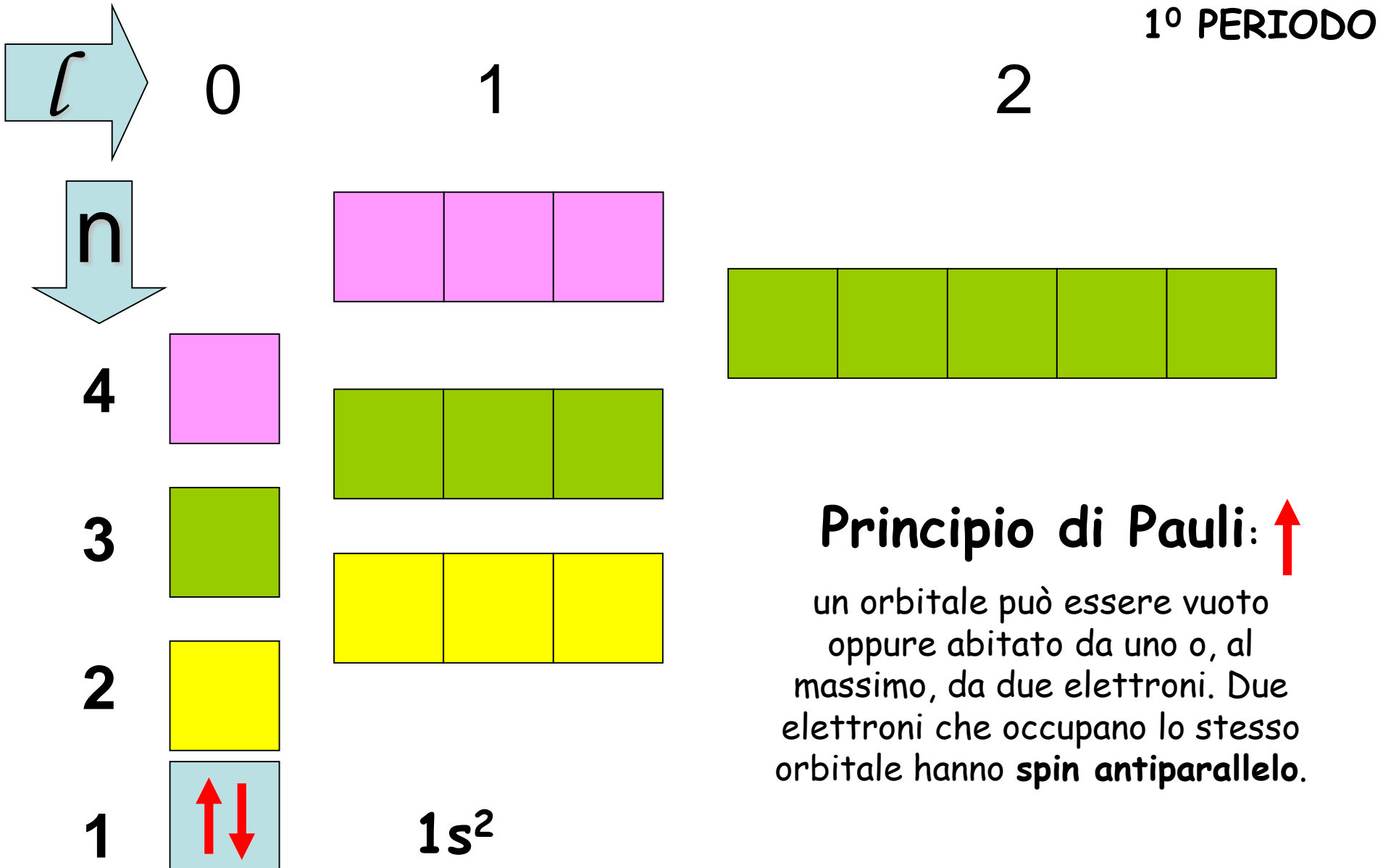


$Z = 2$

Elio

simbolo: He

1° PERIODO

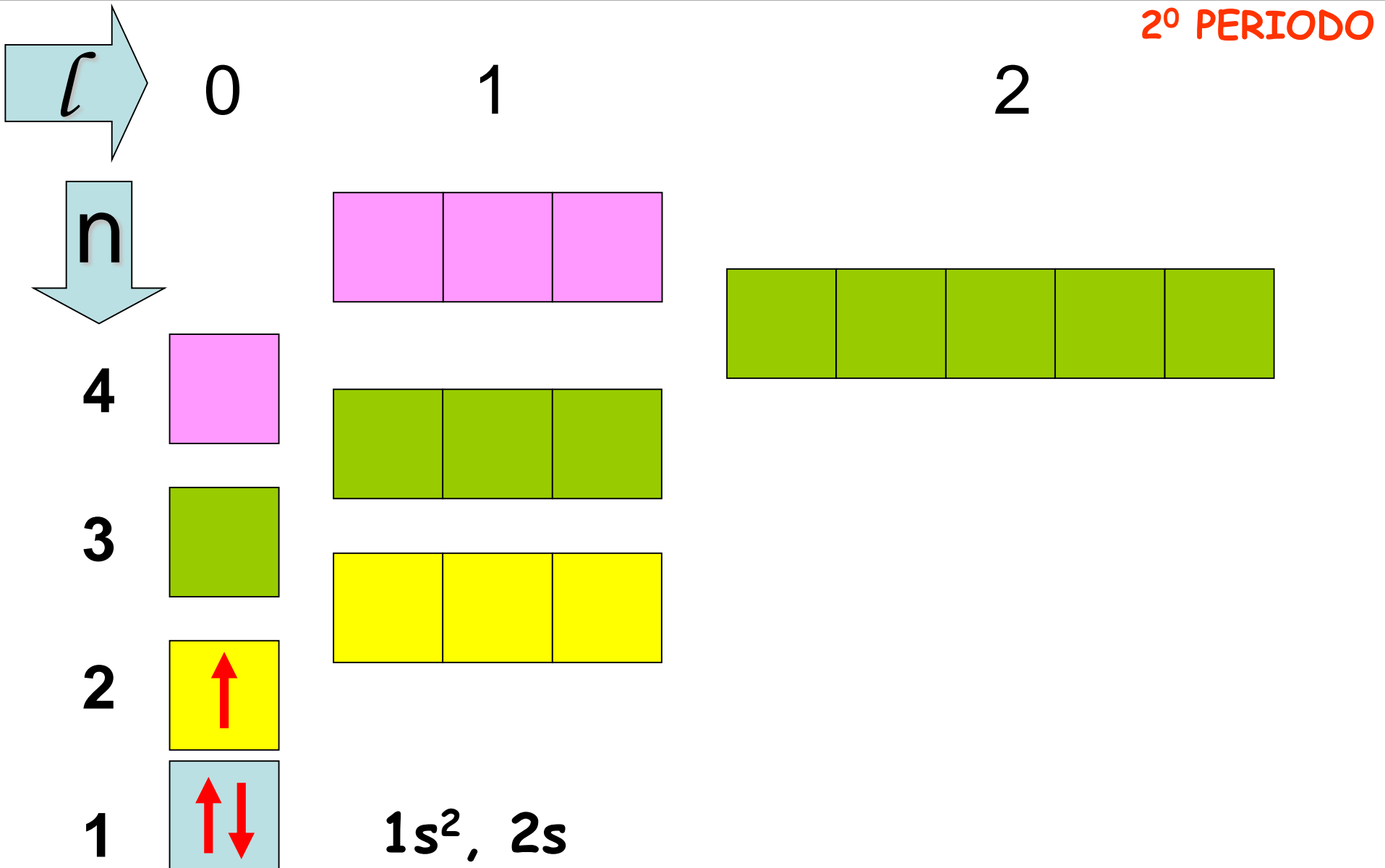


$Z = 3$

Litio

simbolo: Li

2^o PERIODO

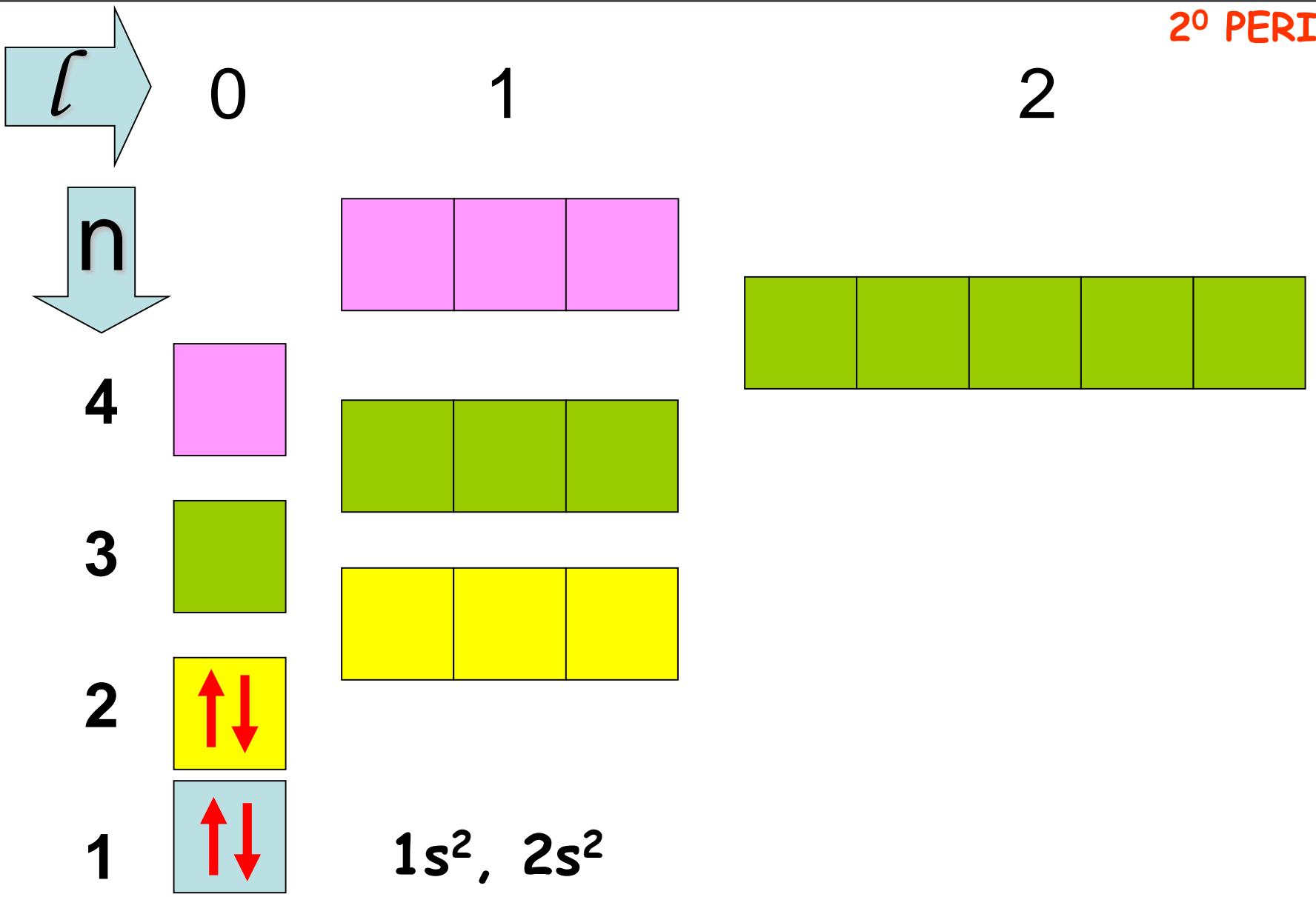


$Z = 4$

Berillio

simbolo: Be

2° PERIODO

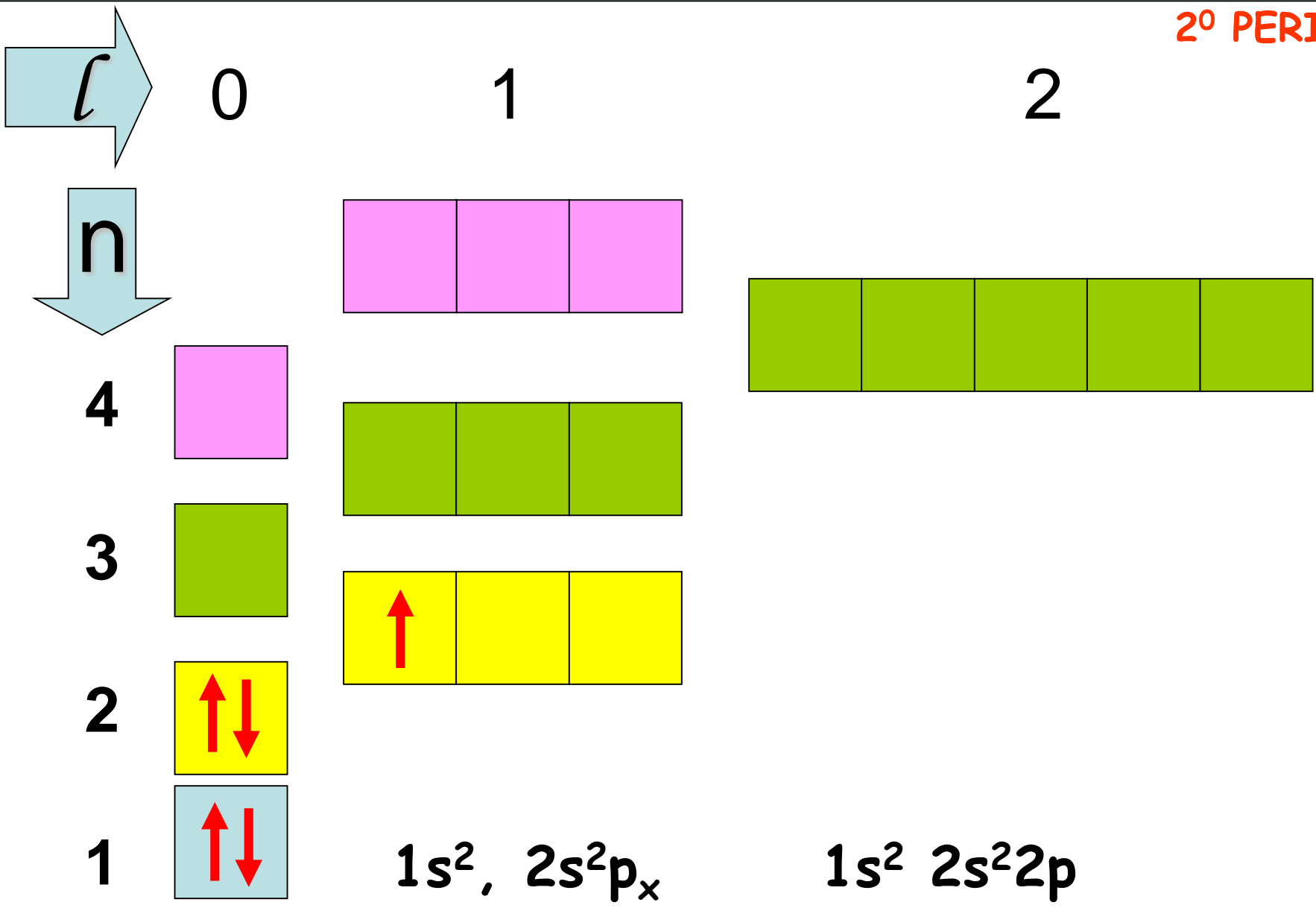


$Z = 5$

Boro

simbolo: B

2° PERIODO

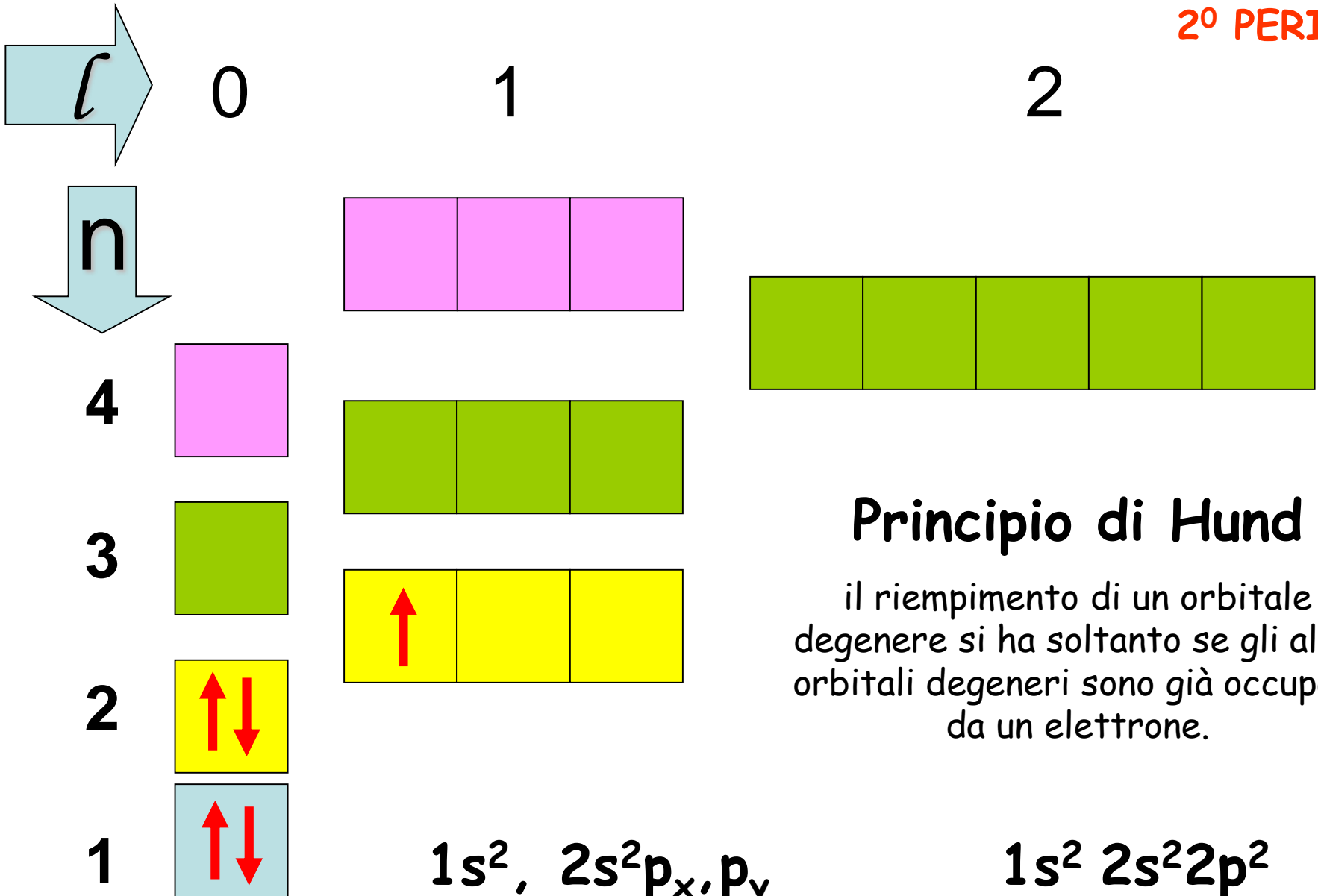


$Z = 6$

Carbonio

simbolo: C

2° PERIODO



Principio di Hund ↑

il riempimento di un orbitale
degenere si ha soltanto se gli altri
orbitali degeneri sono già occupati
da un elettrone.

$1s^2, 2s^2 p_x, p_y$

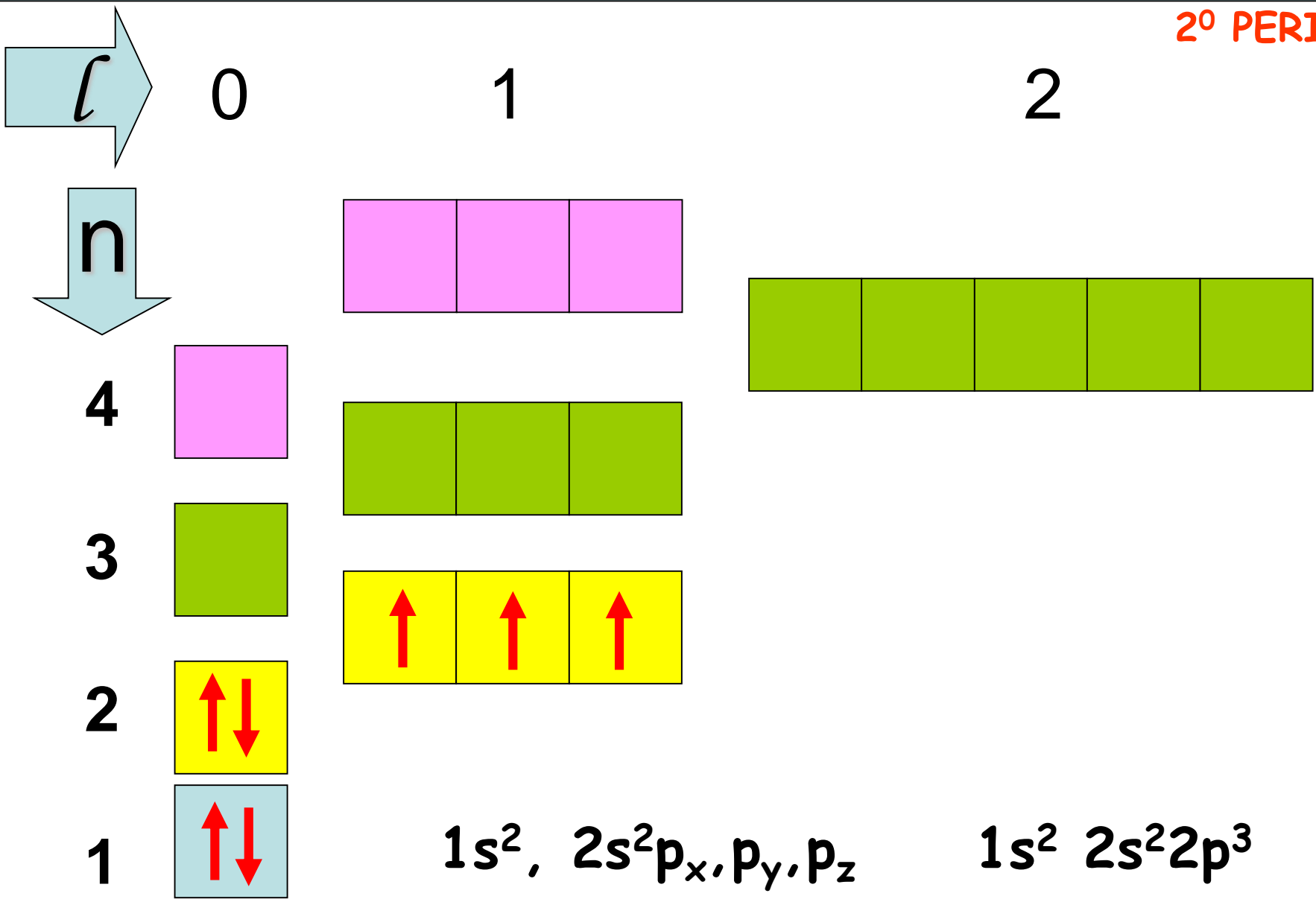
$1s^2 2s^2 2p^2$

$Z = 7$

Azoto

simbolo: N

2° PERIODO

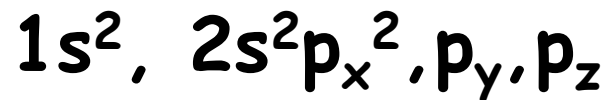
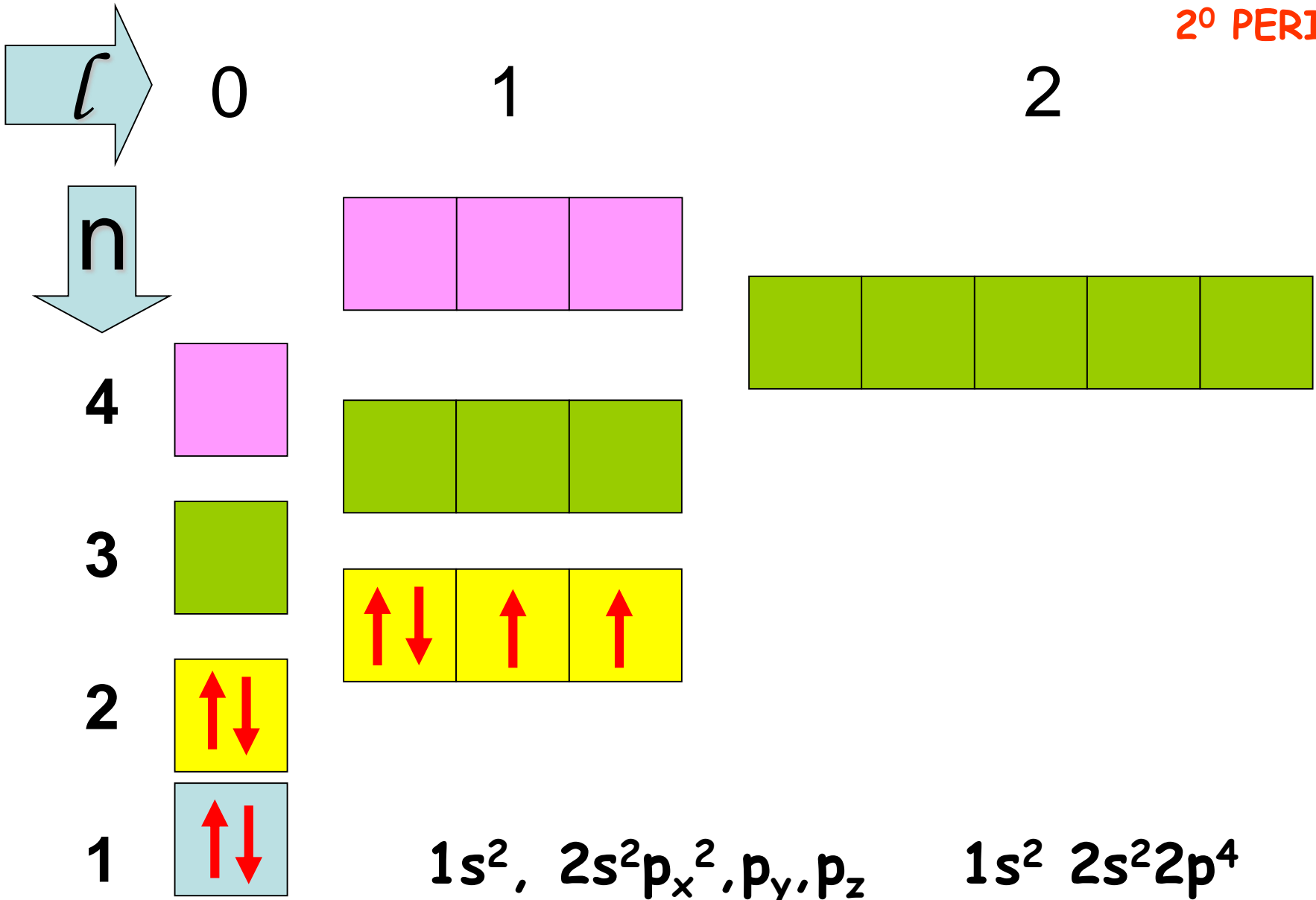


$Z = 8$

Ossigeno

simbolo: O

2° PERIODO

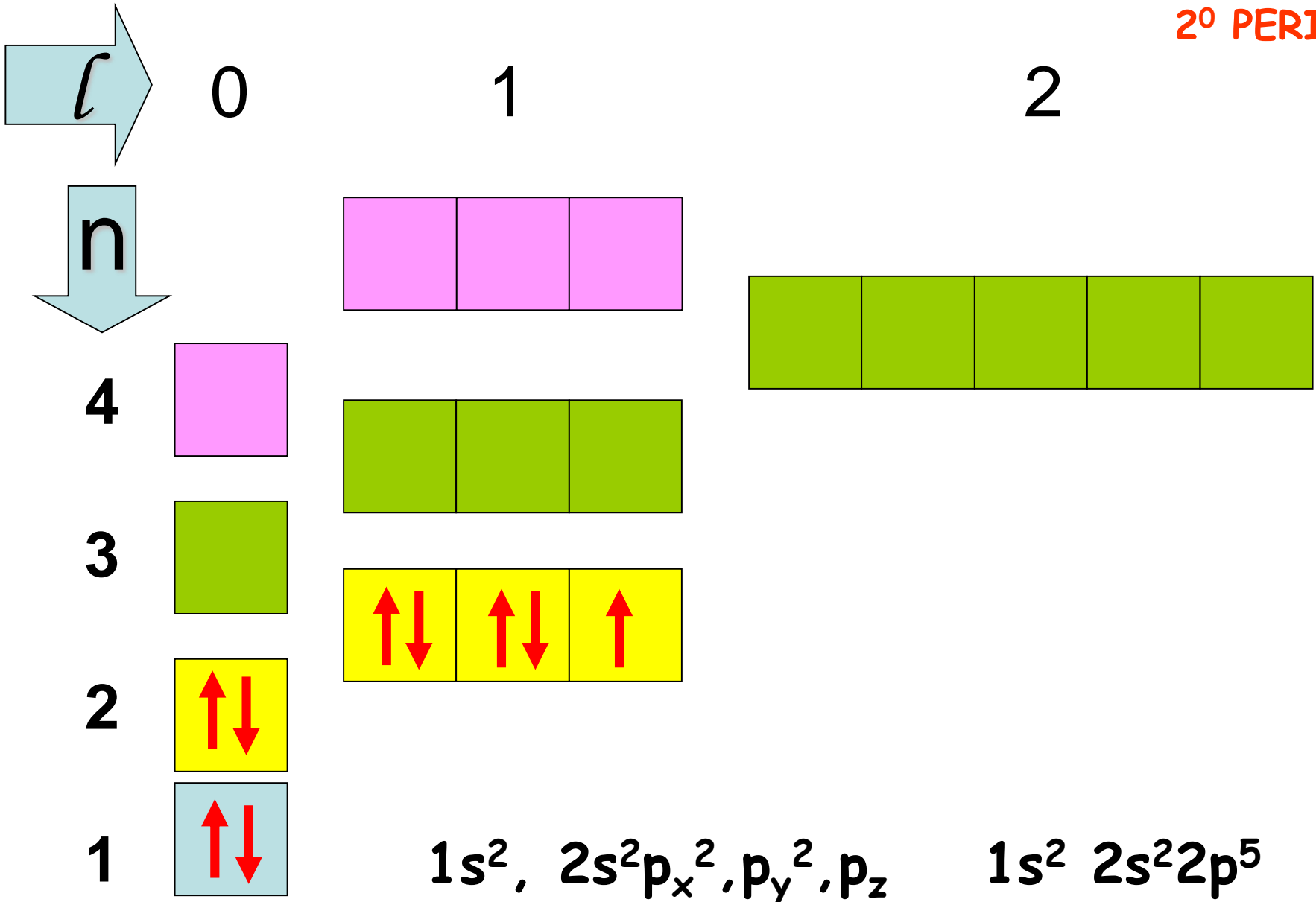


$Z = 9$

Fluoro

simbolo: F

2° PERIODO

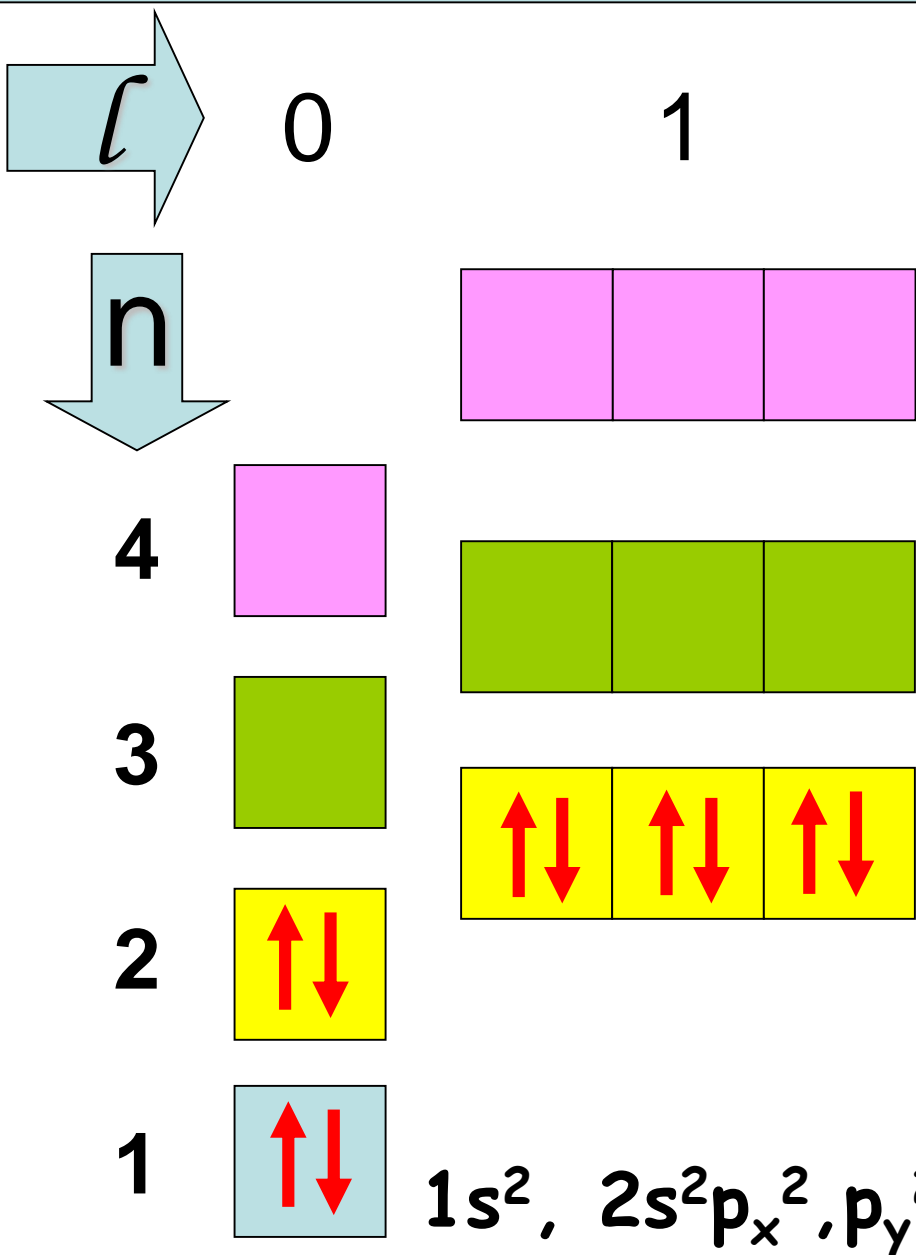


Z = 10

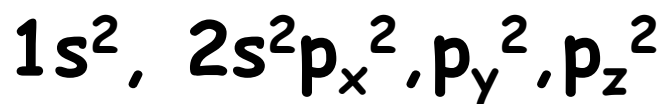
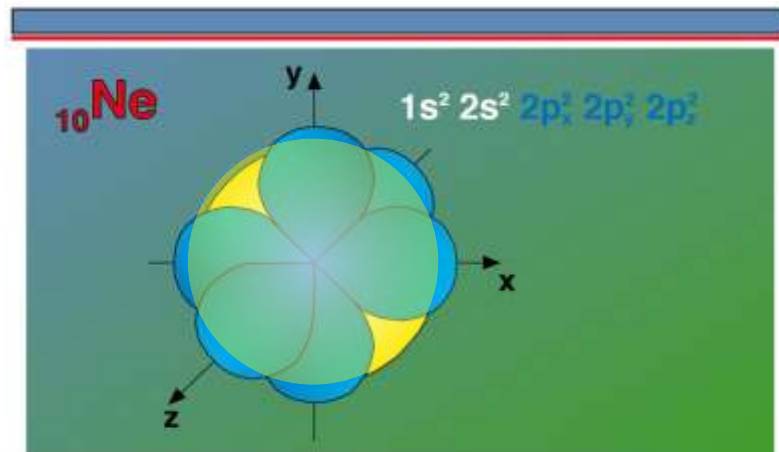
Neon

simbolo: Ne

2° PERIODO



Ottetto completo

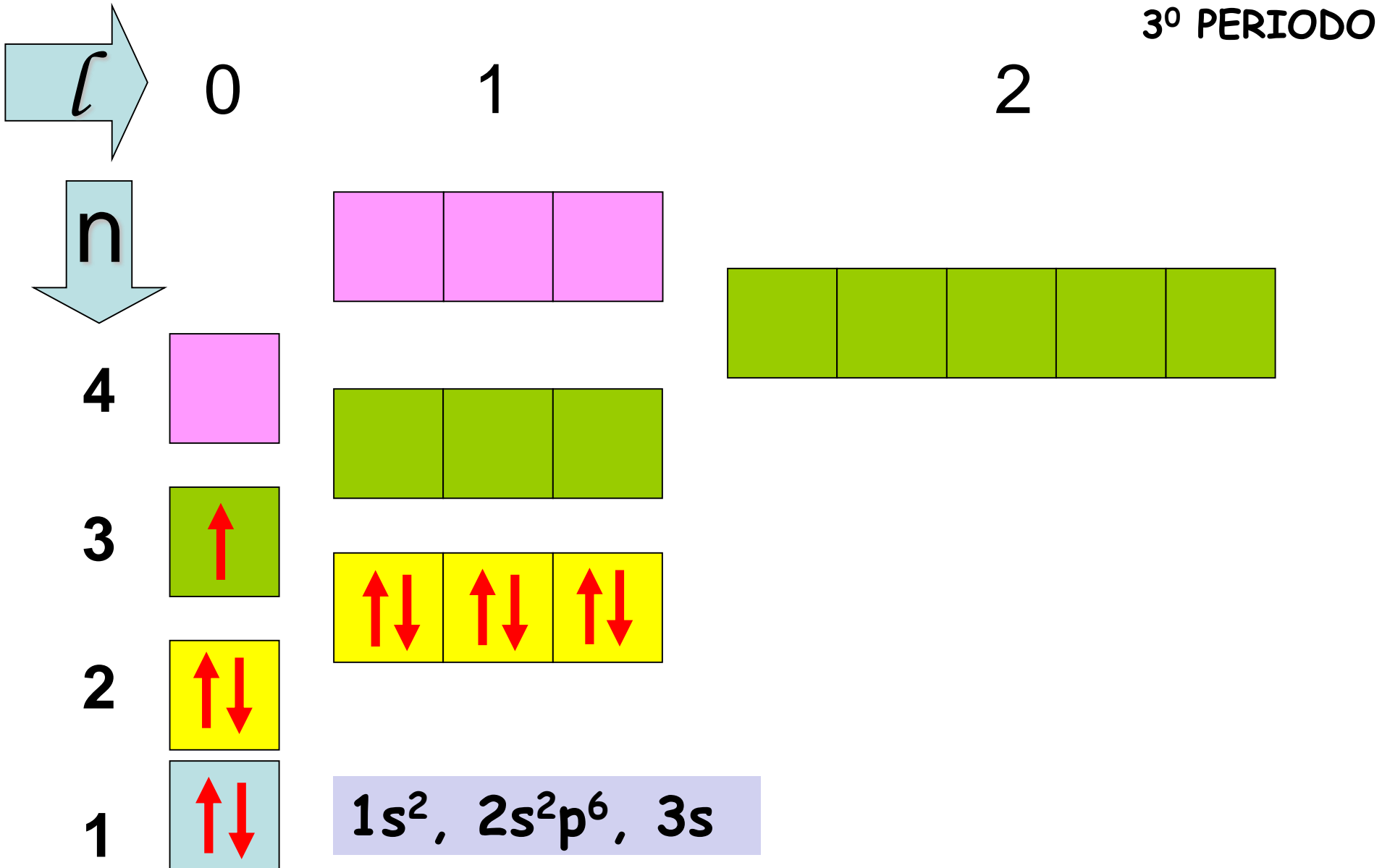


$Z = 11$

Sodio

simbolo: Na

3^o PERIODO

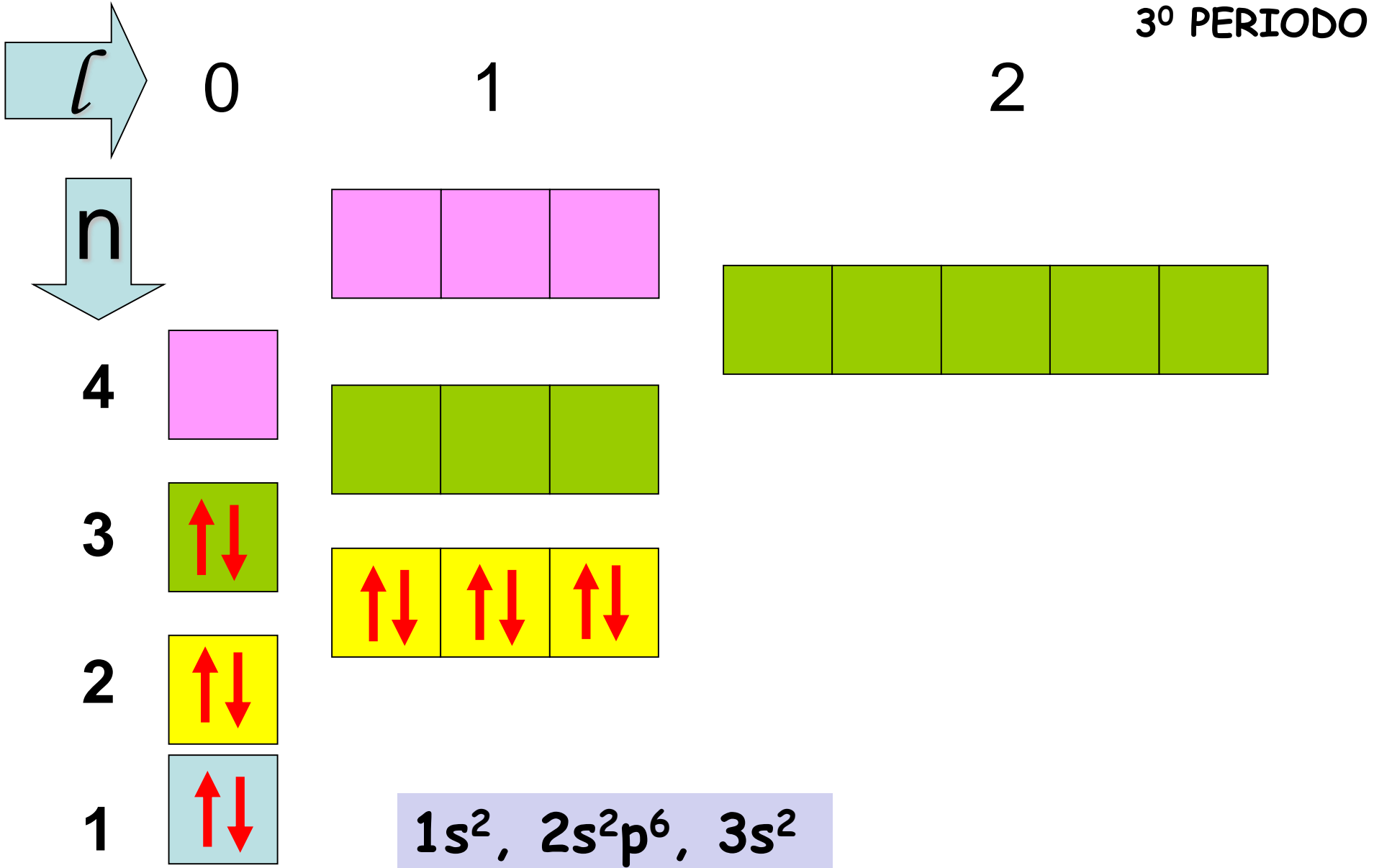


$Z = 12$

Magnesio

simbolo: Mg

3^o PERIODO

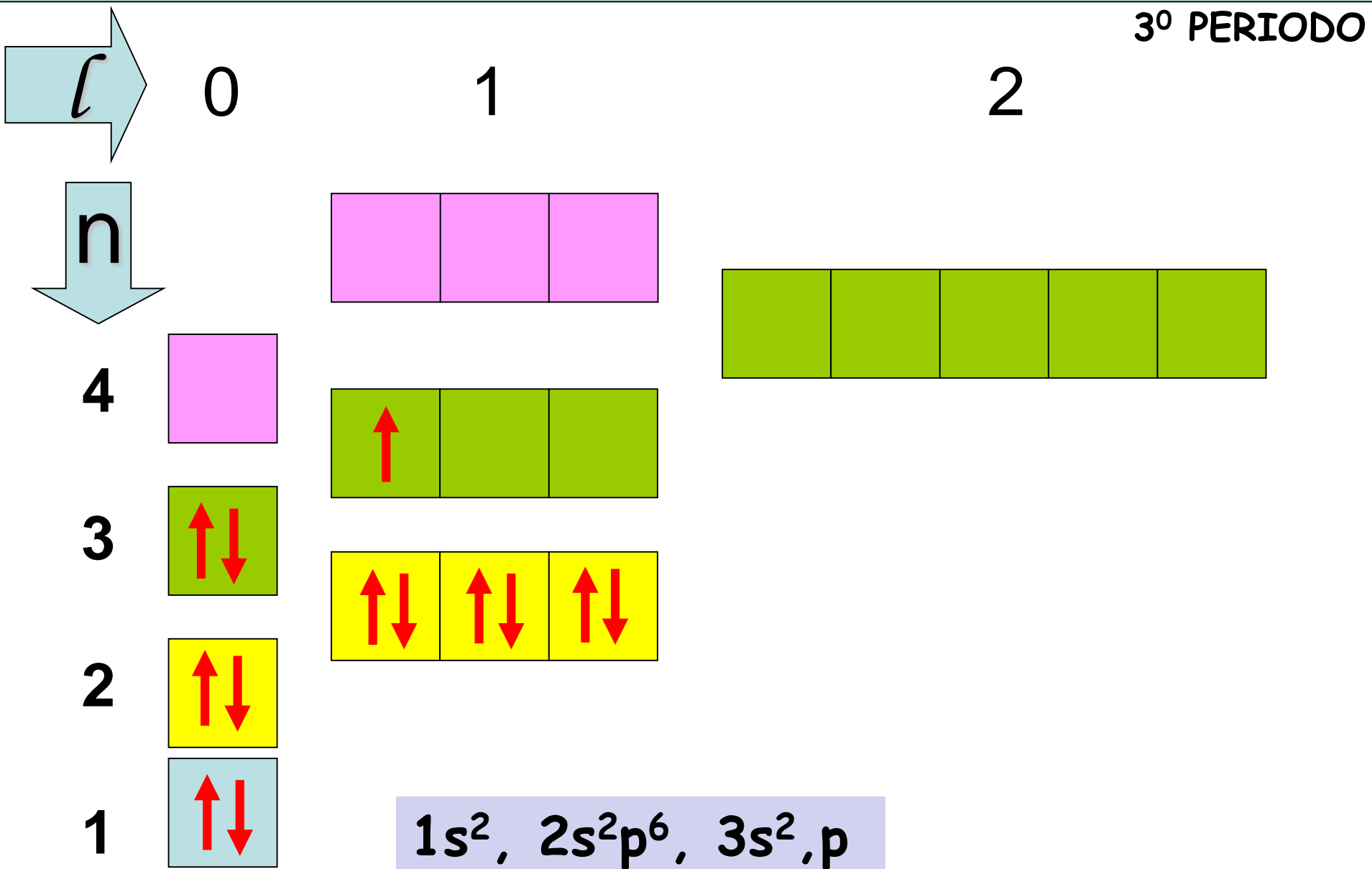


$Z = 13$

Alluminio

simbolo: Al

3^o PERIODO

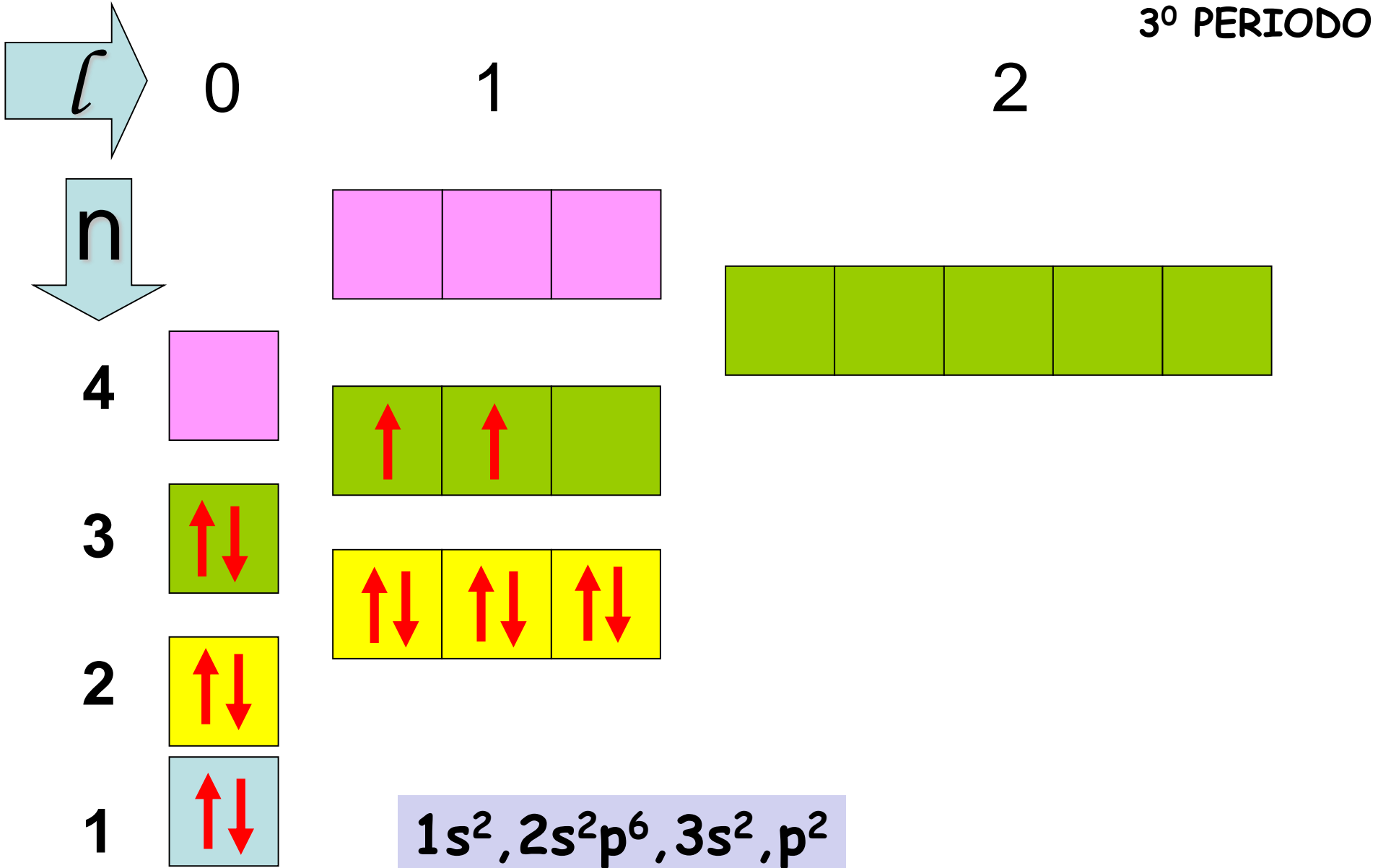


$Z = 14$

Silicio

simbolo: Si

3º PERIODO

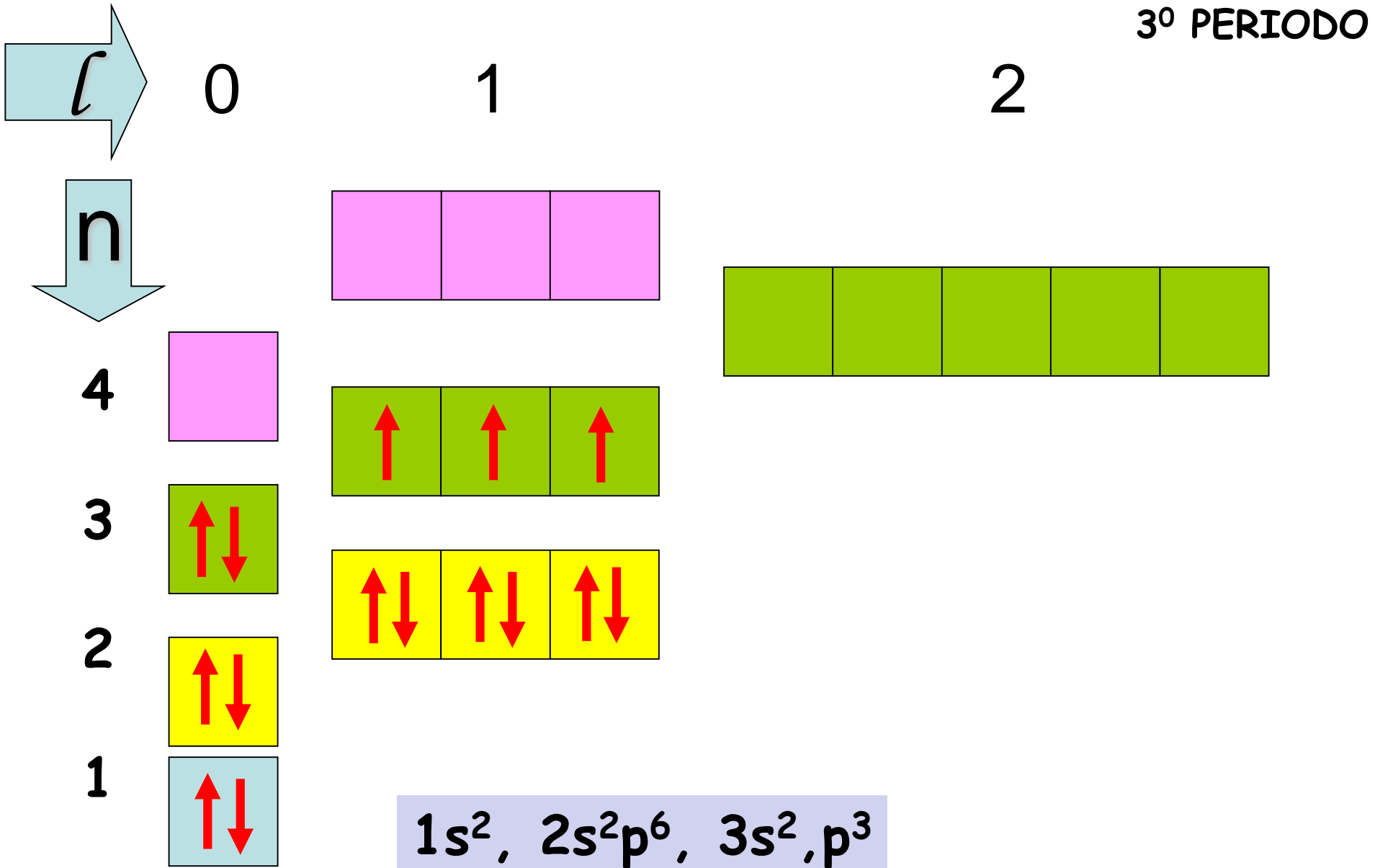


$Z = 15$

Fosforo

simbolo: P

3° PERIODO

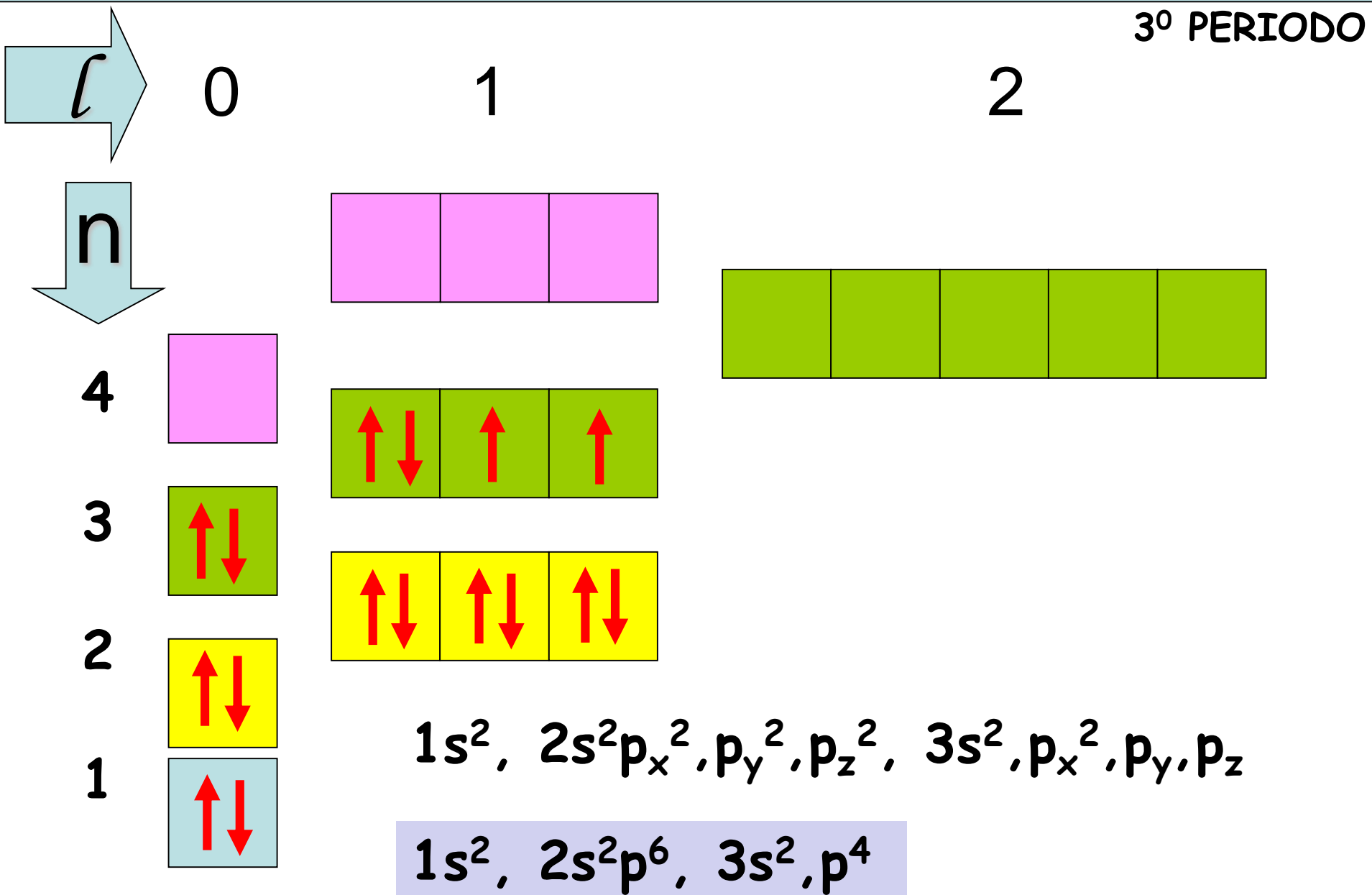


$Z = 16$

Zolfo

simbolo: S

3° PERIODO

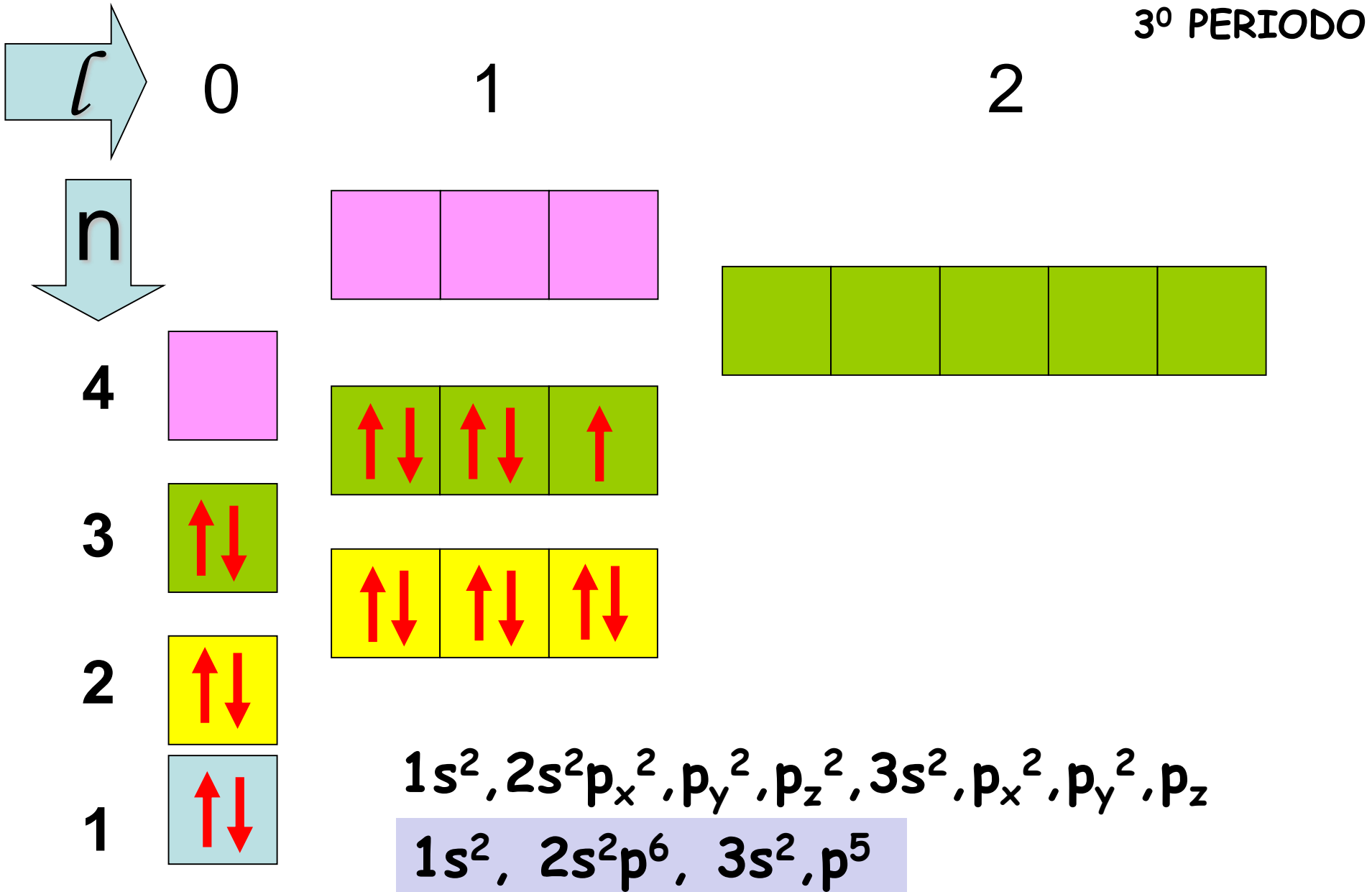


$Z = 17$

Cloro

simbolo: Cl

3^o PERIODO

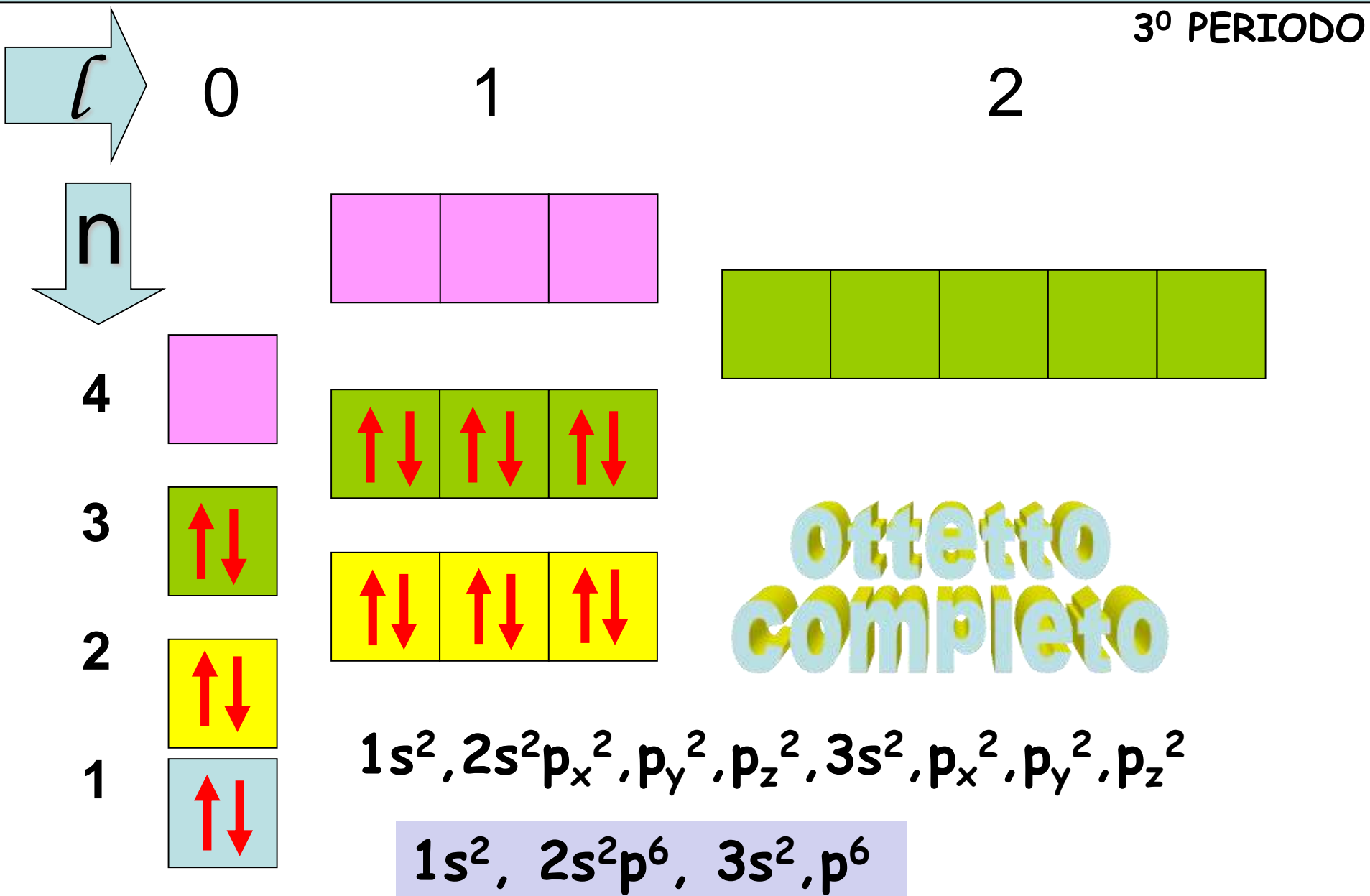


$Z = 18$

Argon

simbolo: Ar

3° PERIODO

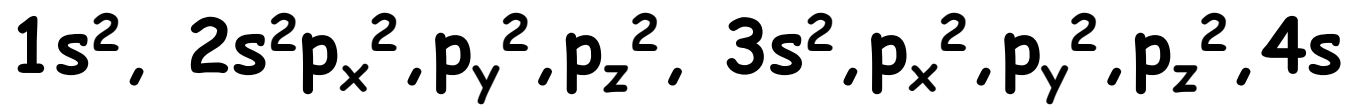
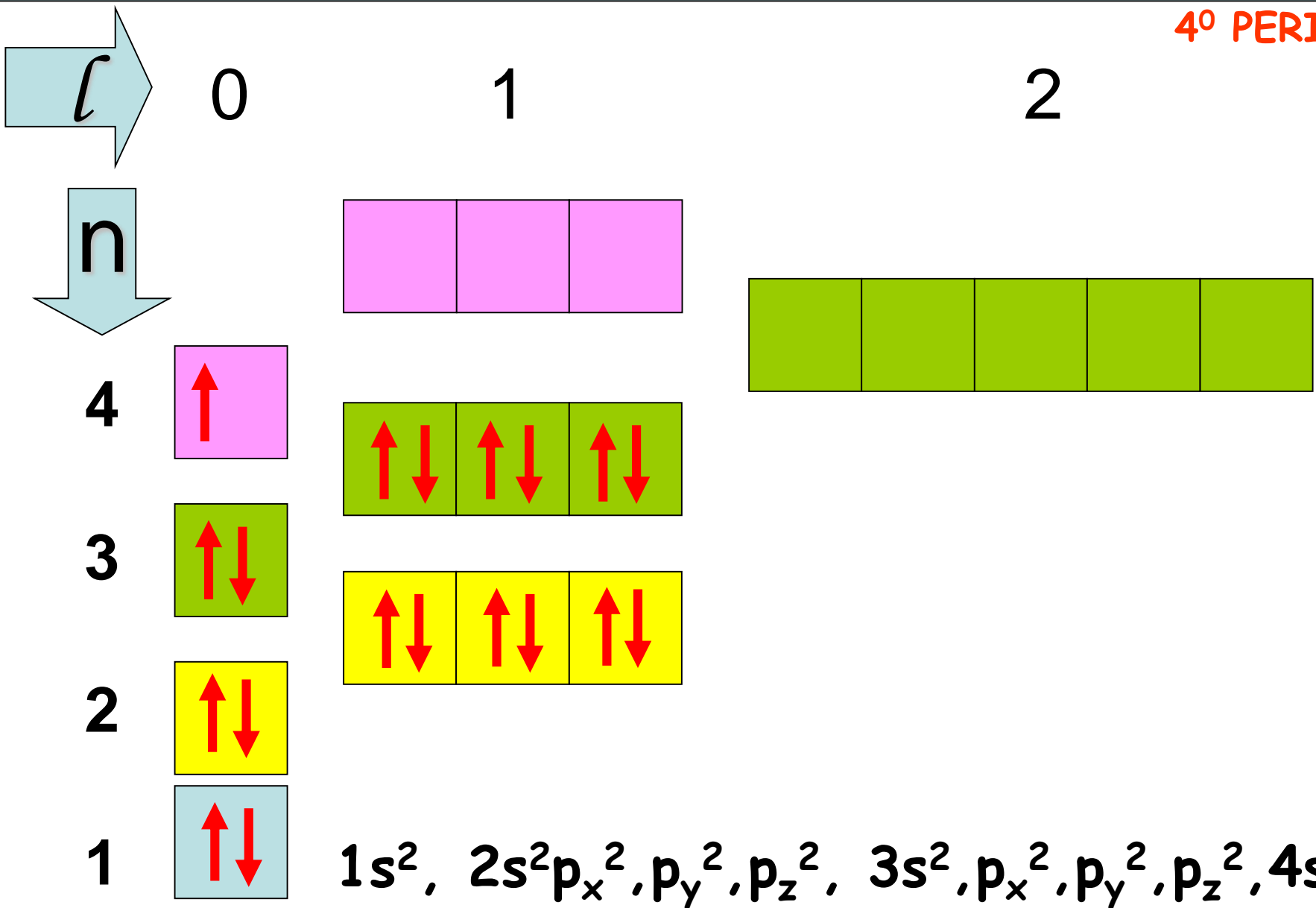


Z = 19

Potassio

simbolo: K

4° PERIODO

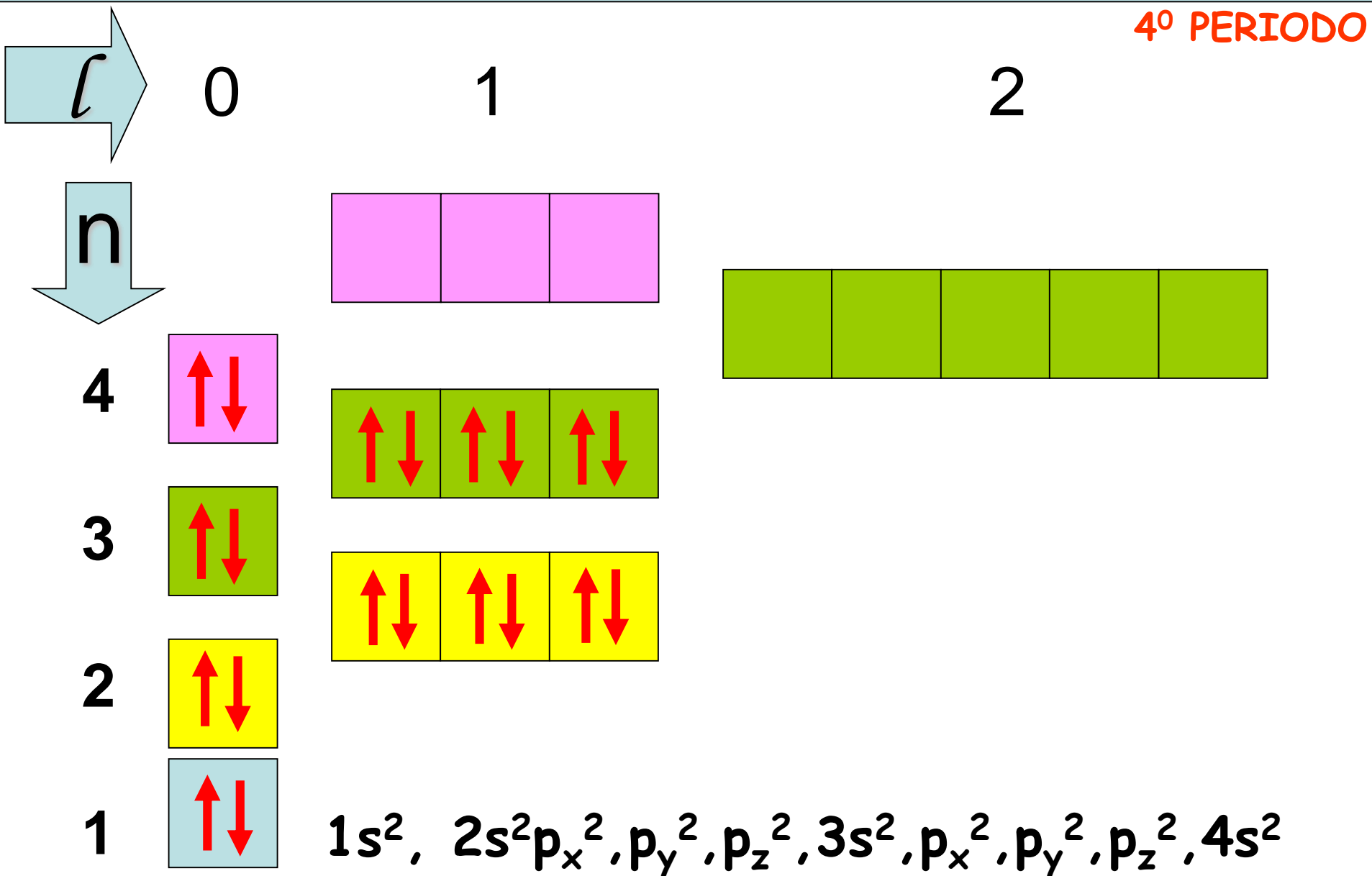


Z = 20

Calcio

simbolo: Ca

4^o PERIODO

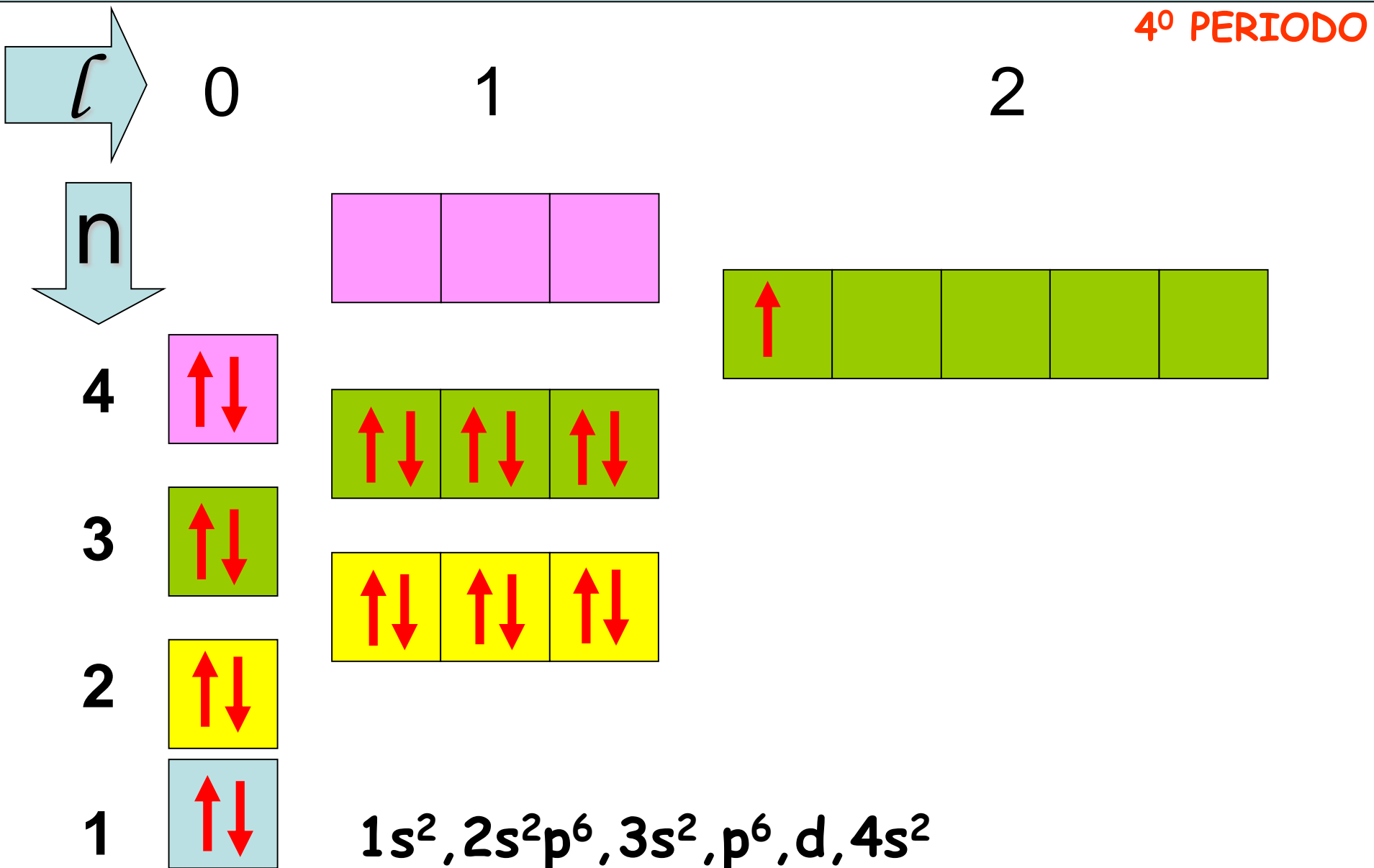


Z = 21

Scandio

simbolo: Sc

4^o PERIODO

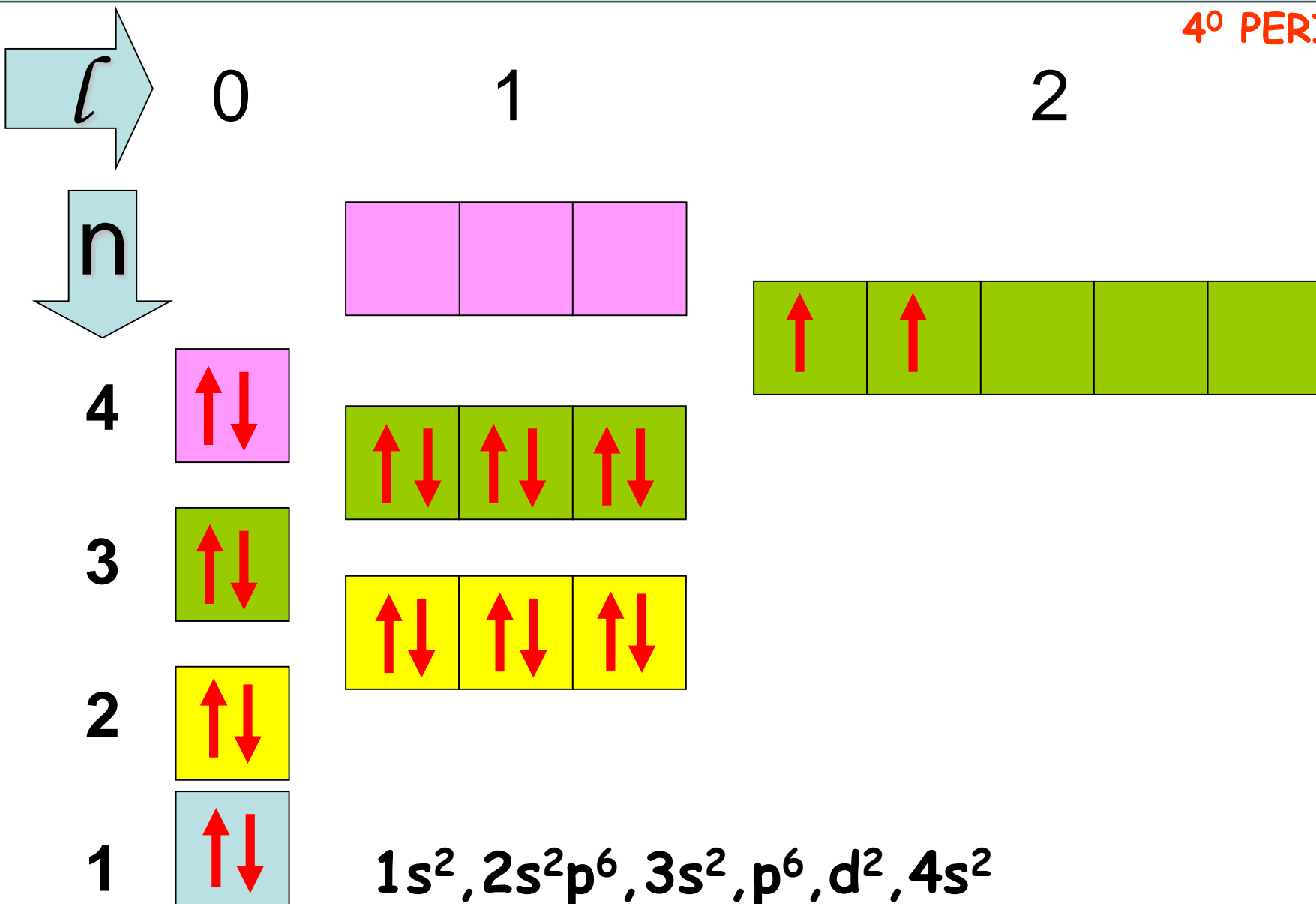


Z = 22

Titanio

simbolo: Ti

4^o PERIODO

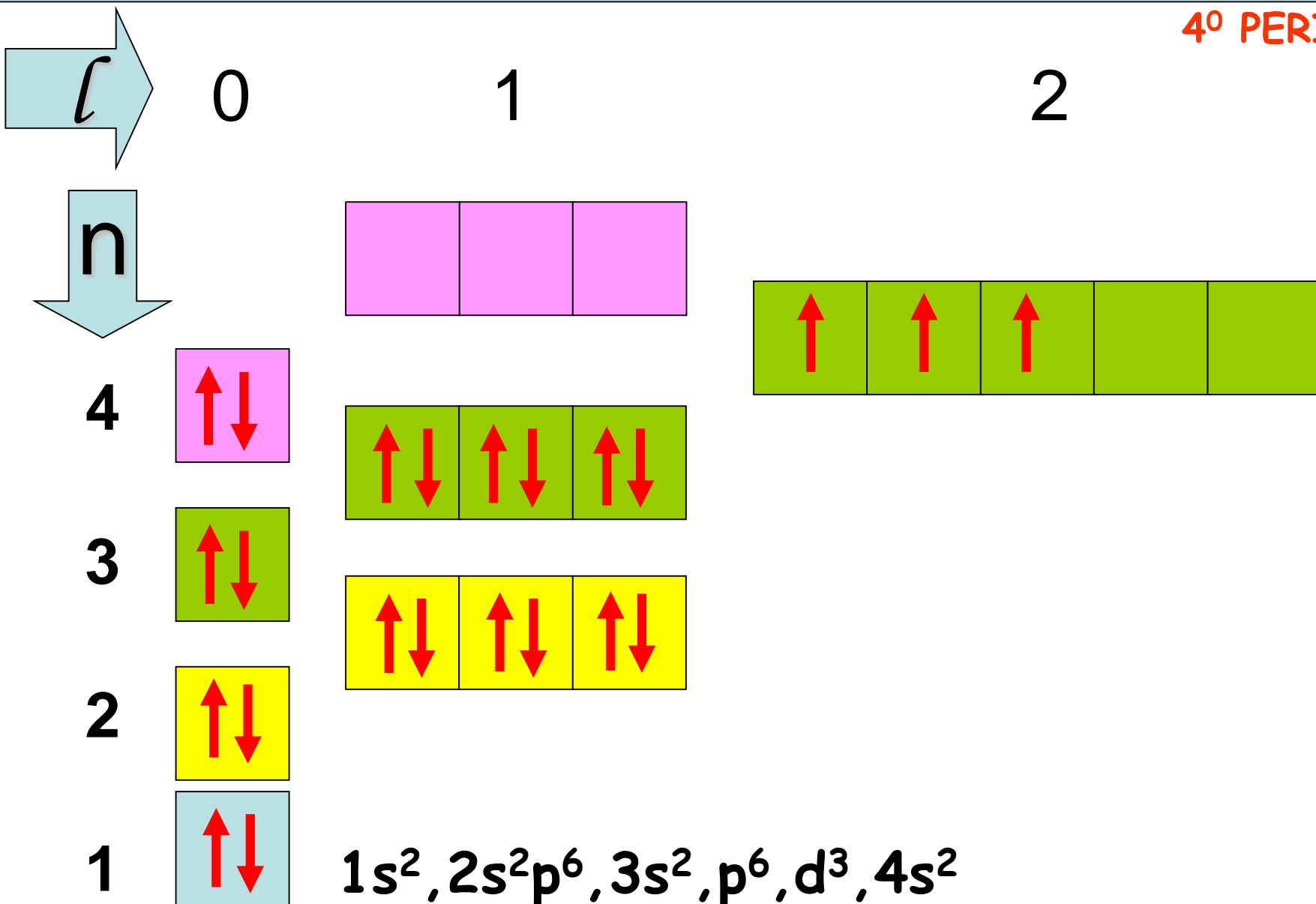


$Z = 23$

Vanadio

simbolo: V

4^o PERIODO

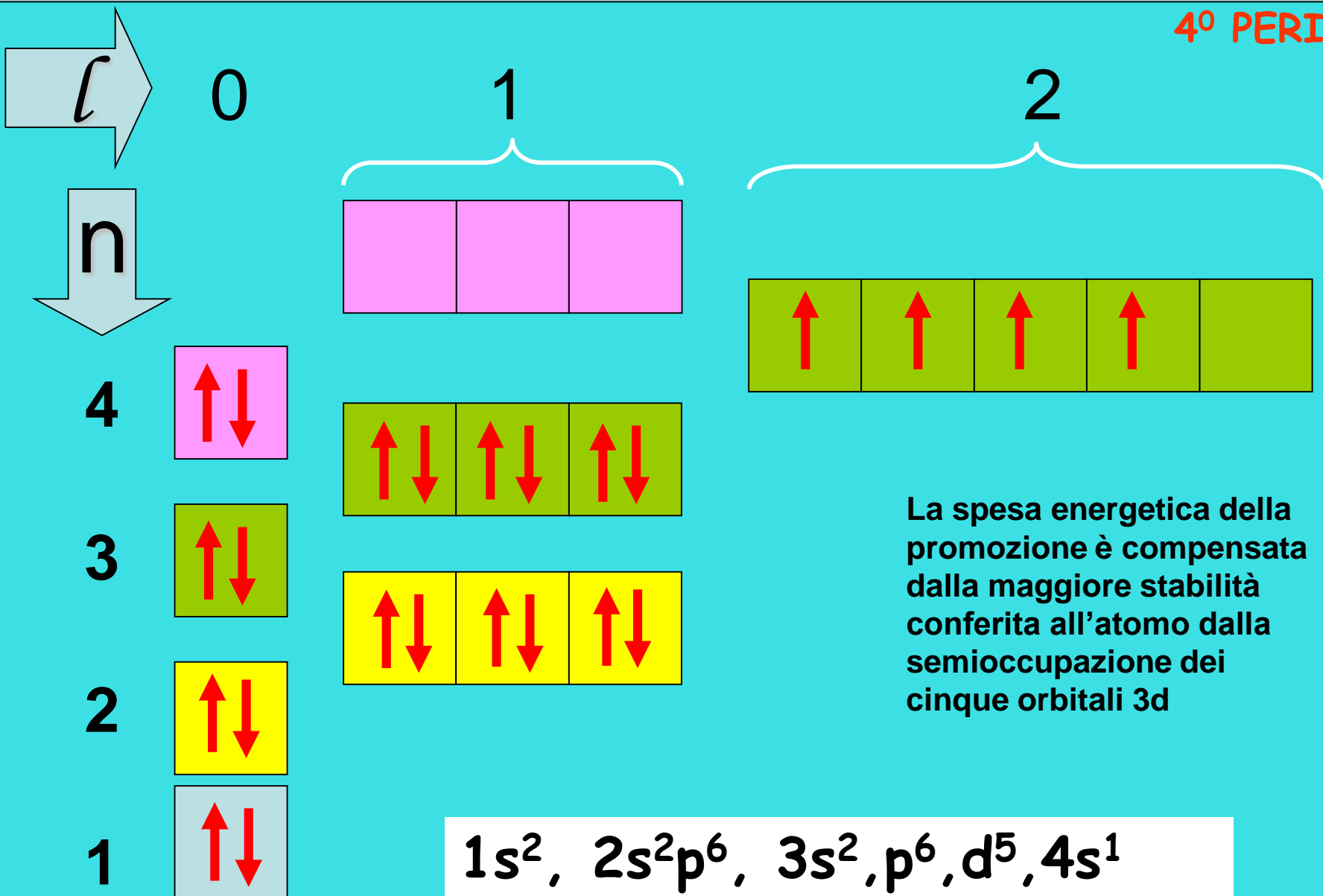


Z = 24

Cromo

simbolo: Cr

4^o PERIODO

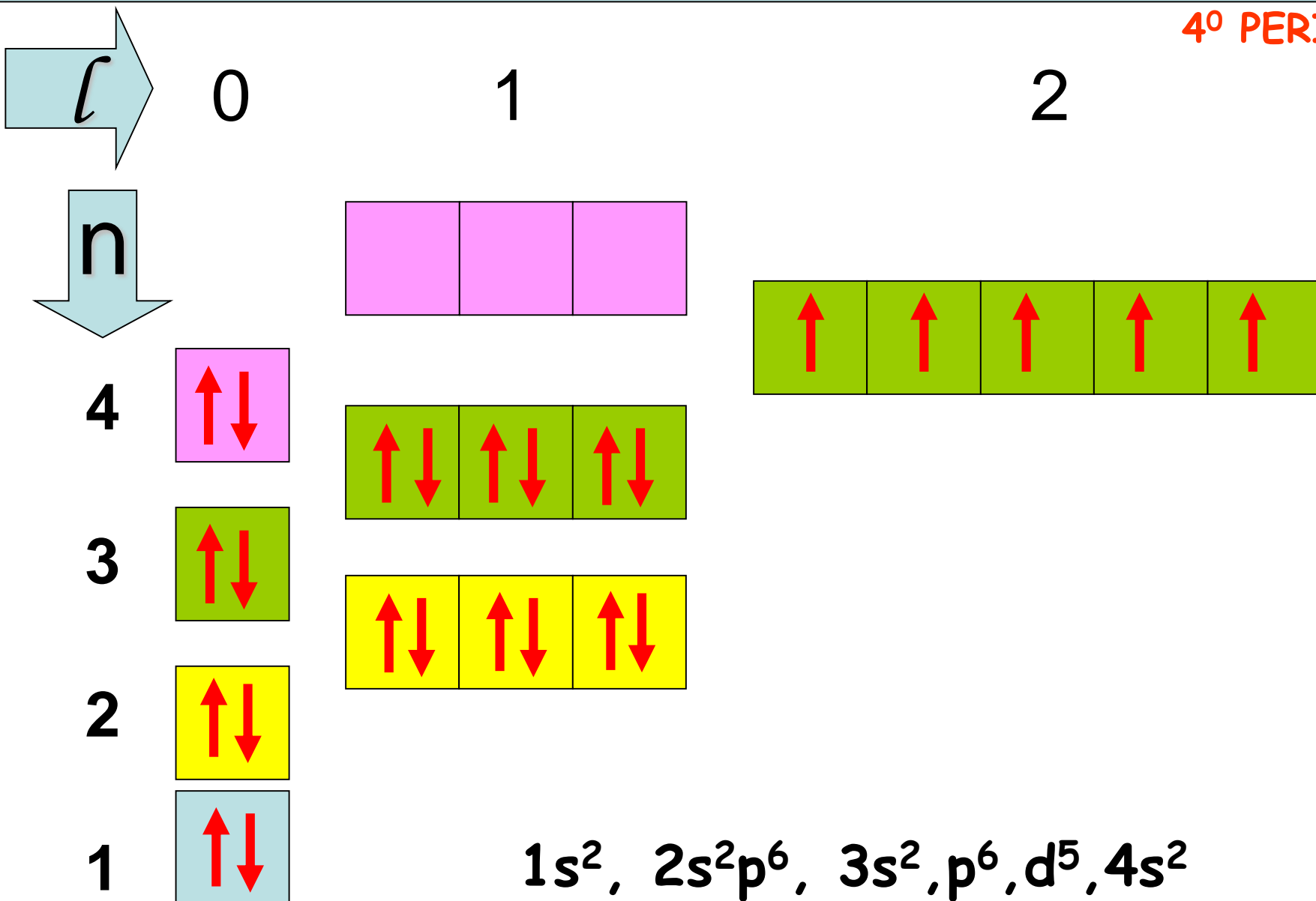


$Z = 25$

Manganese

simbolo: Mn

4^o PERIODO

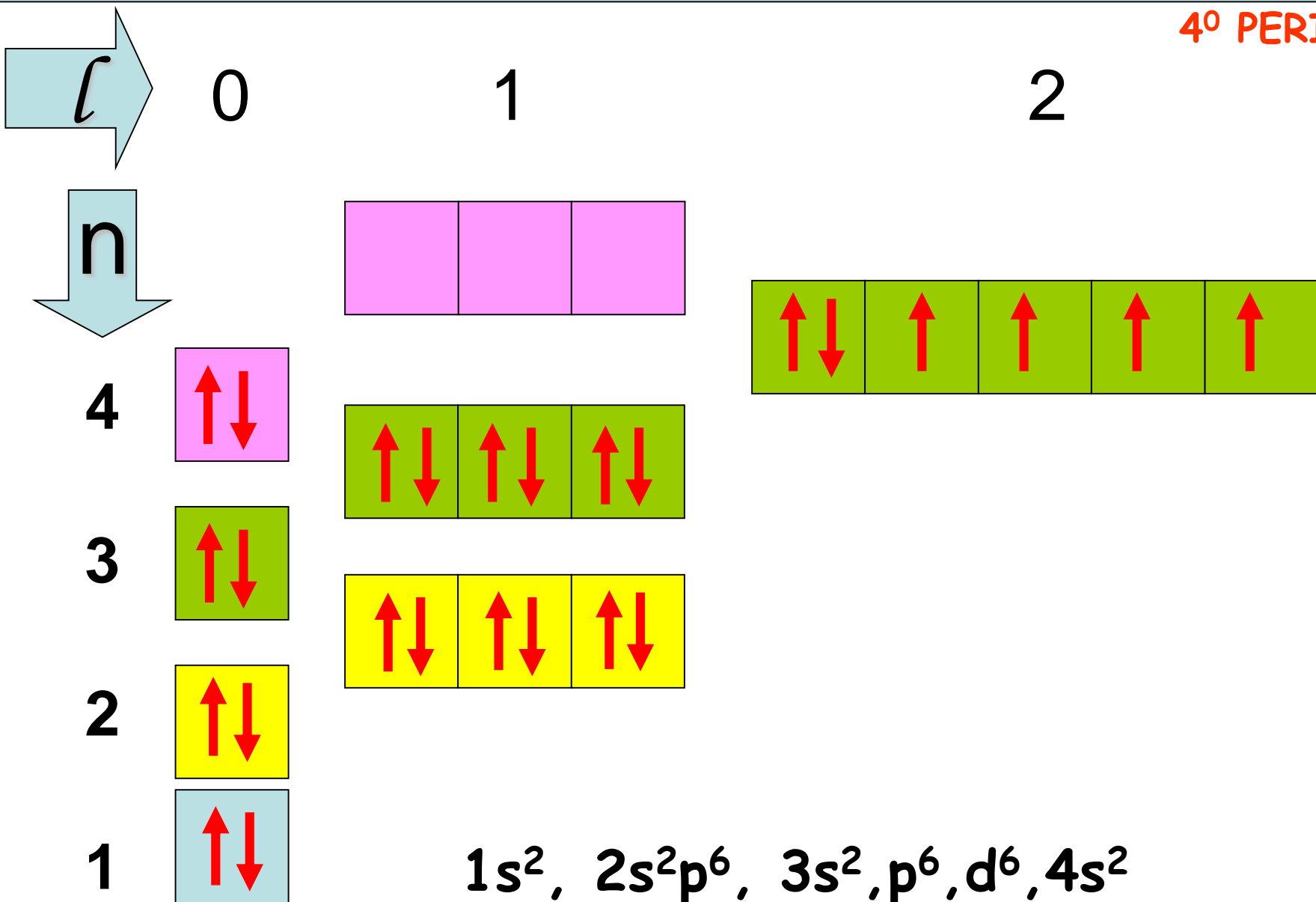


Z = 26

Ferro

simbolo: Fe

4^o PERIODO

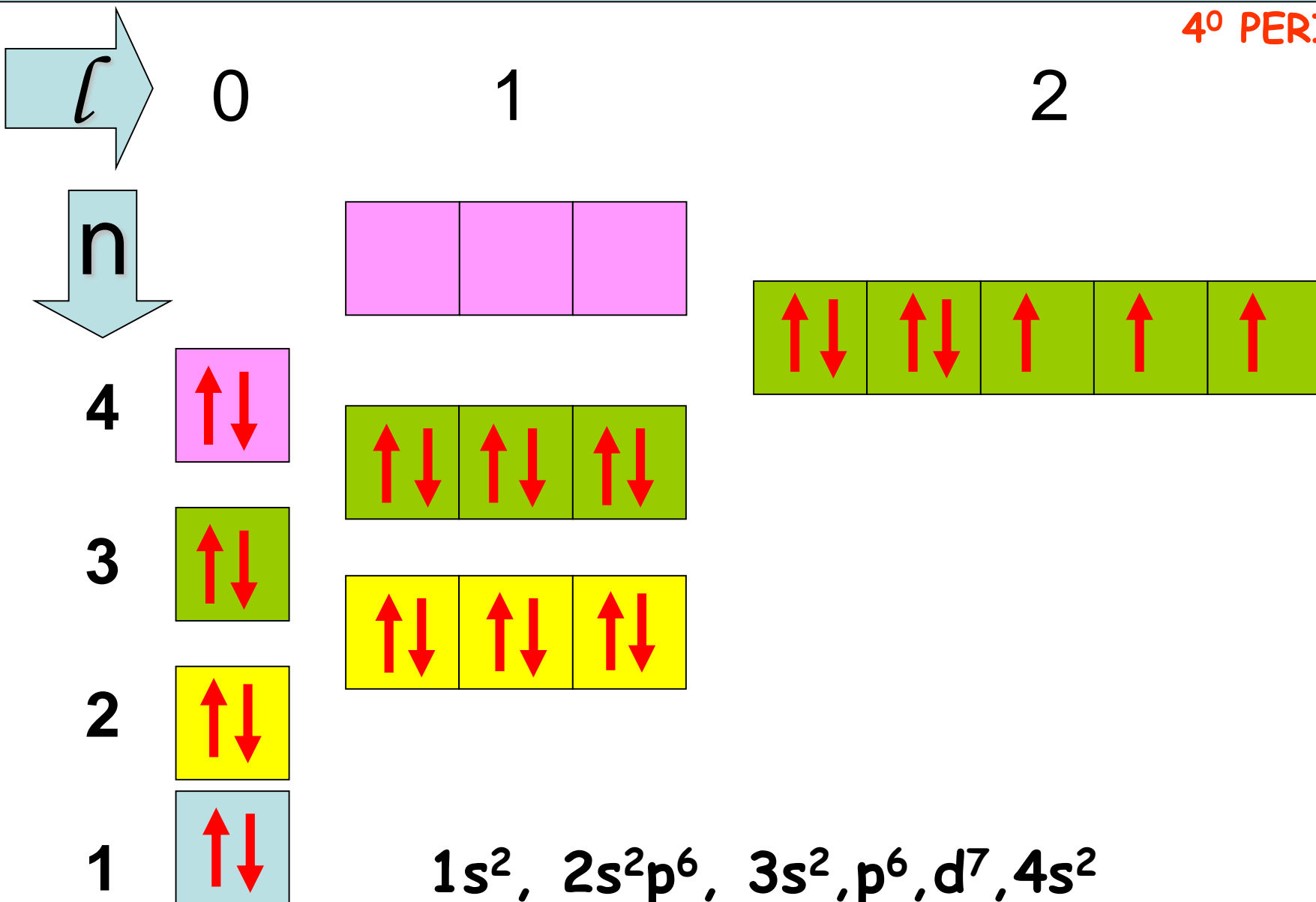


$Z = 27$

Cobalto

simbolo: *Co*

4^o PERIODO

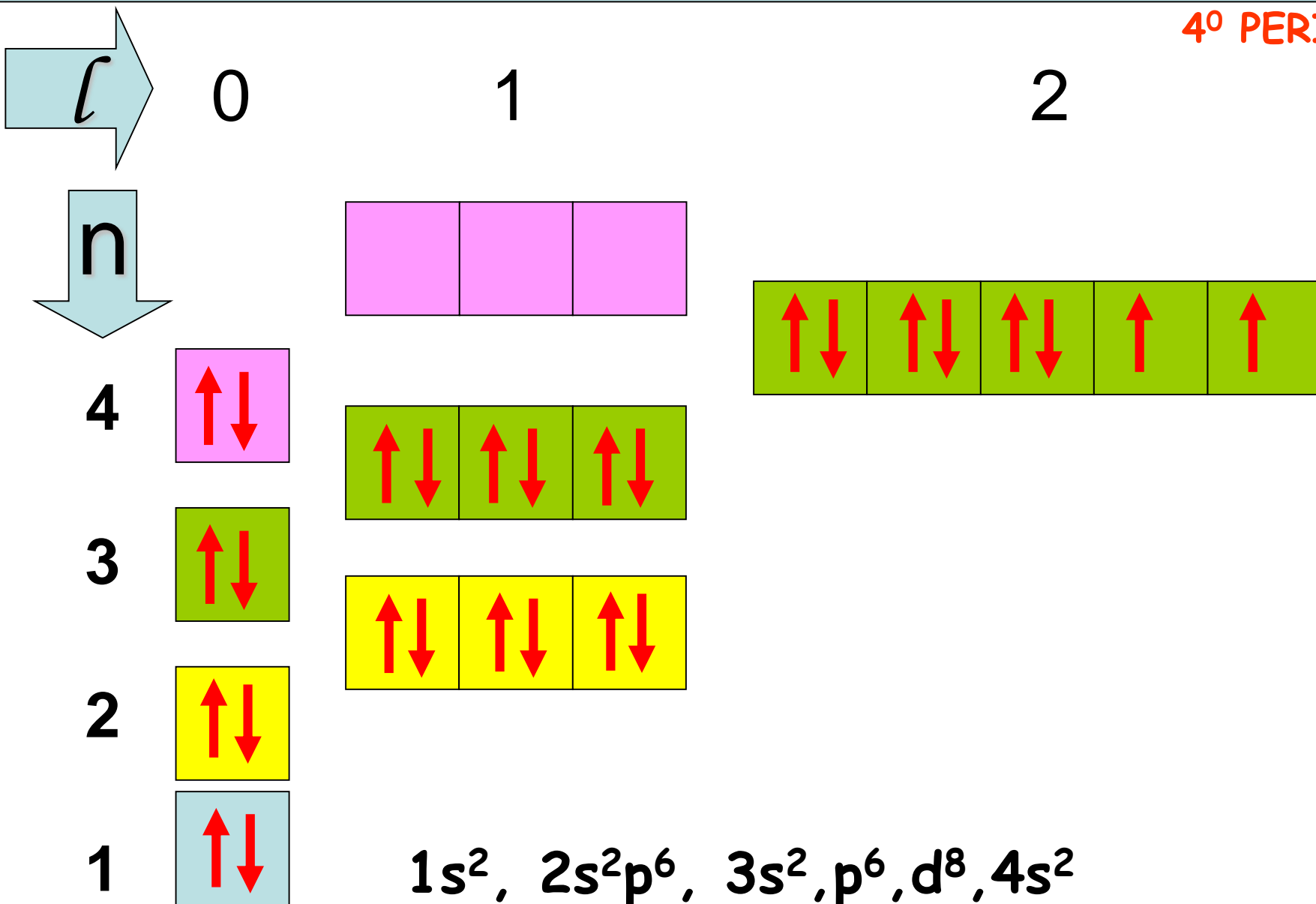


$Z = 28$

Nichel

simbolo: Ni

4^o PERIODO

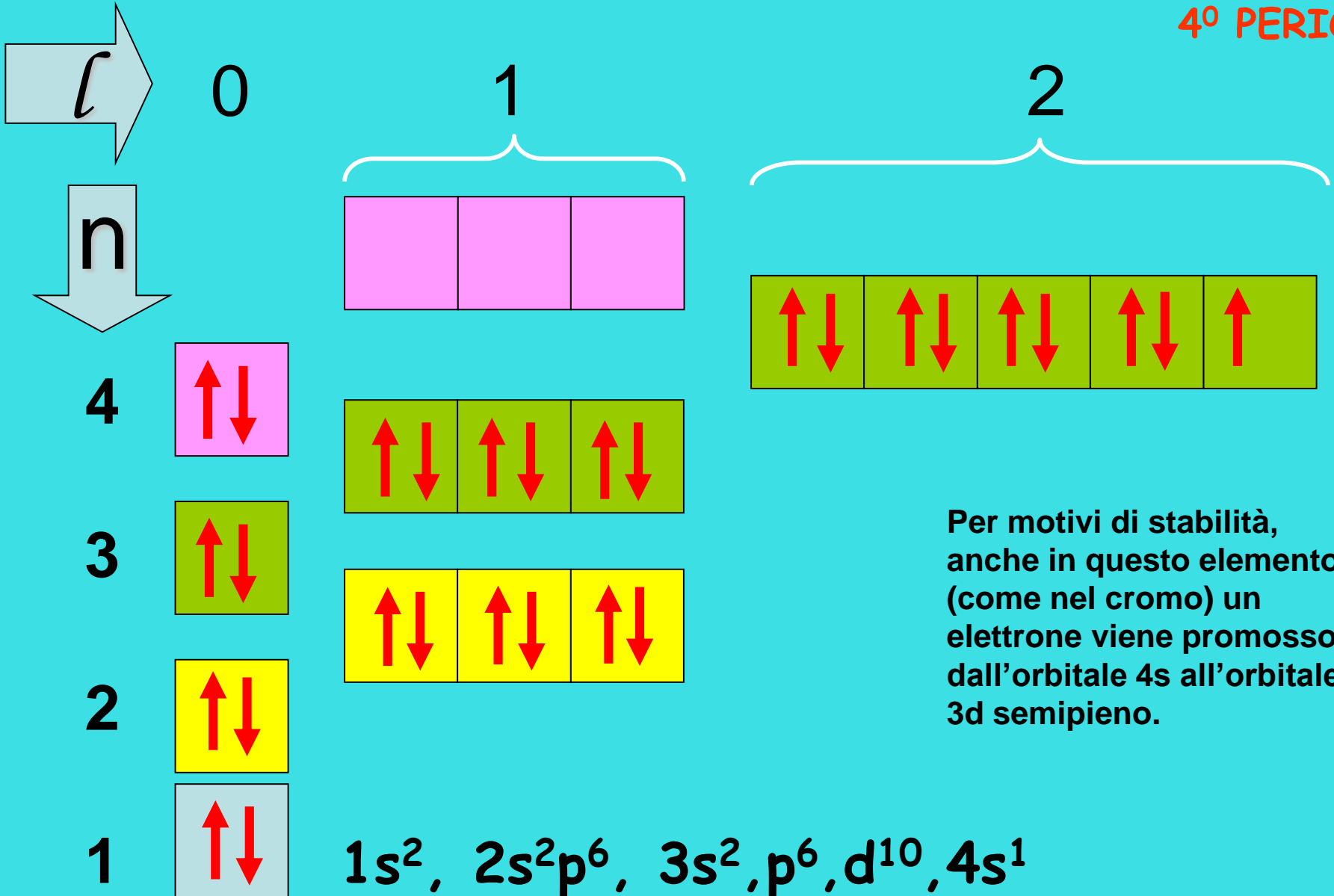


Z = 29

Rame

simbolo: Cu

4^o PERIODO



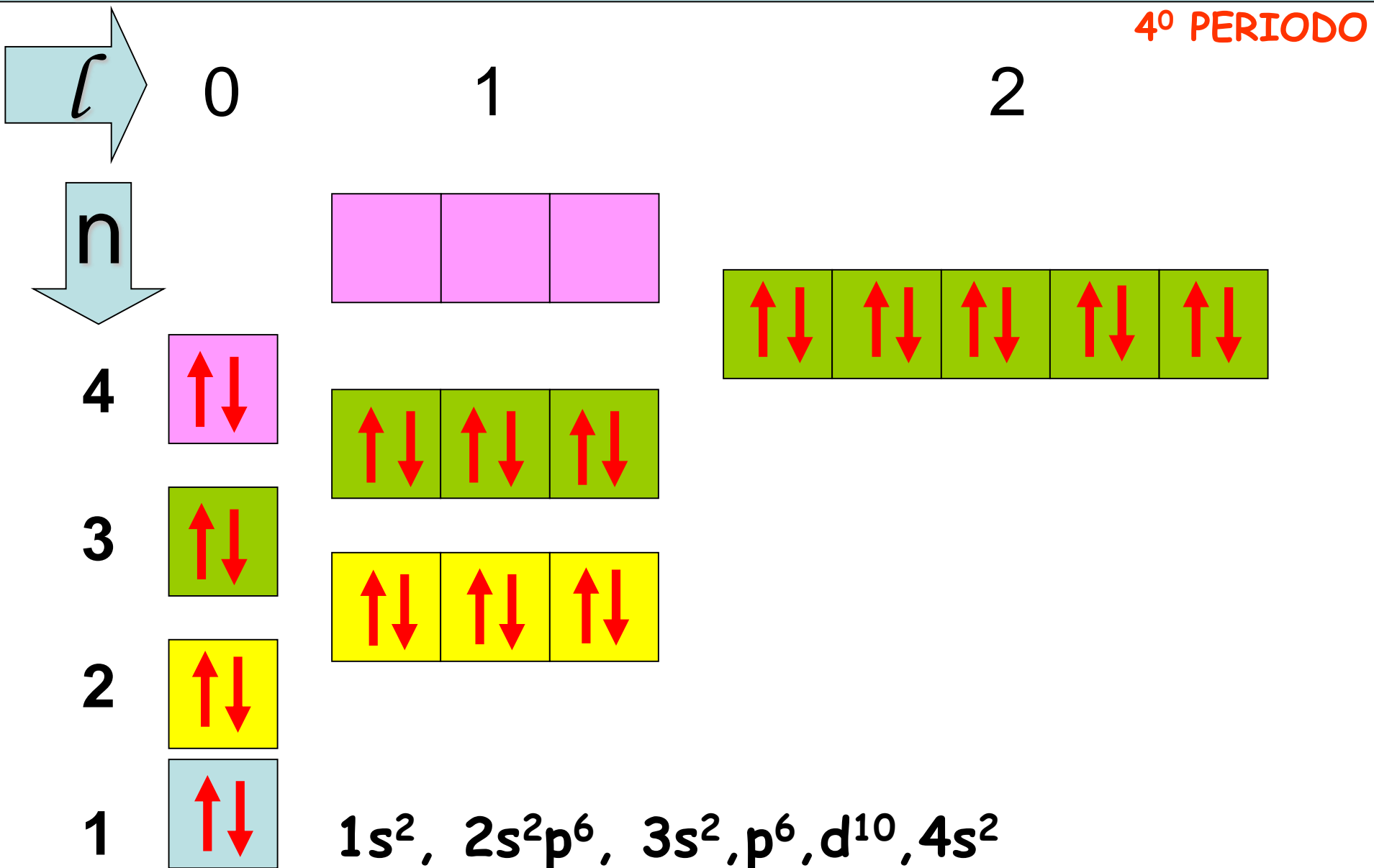
Per motivi di stabilità, anche in questo elemento (come nel cromo) un elettrone viene promosso dall'orbitale 4s all'orbitale 3d semipieno.

$Z = 30$

Zinco

simbolo: Zn

4^o PERIODO

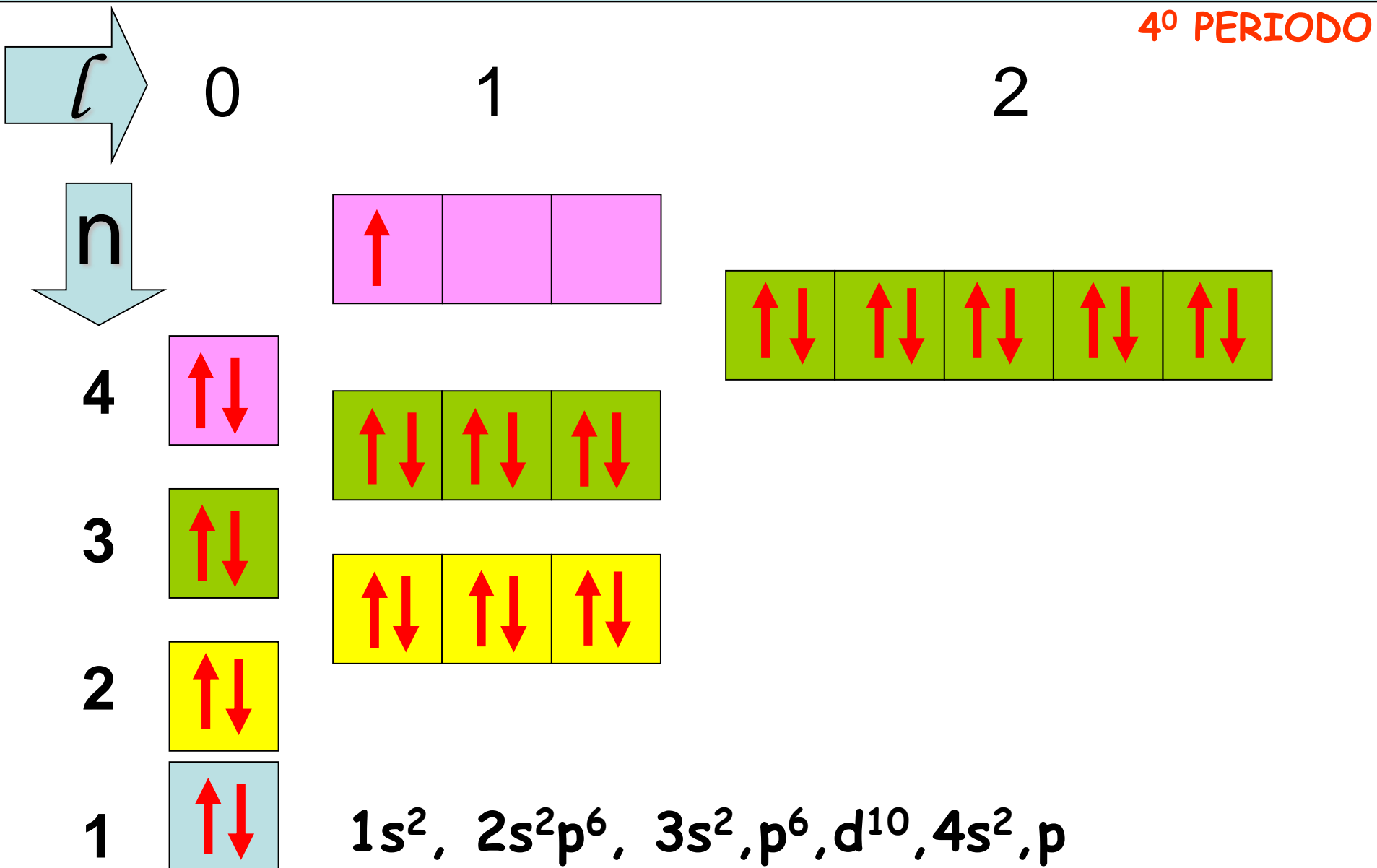


Z = 31

Gallio

simbolo: Ga

4^o PERIODO

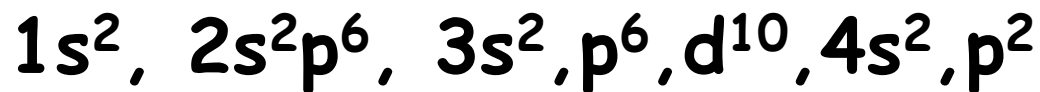
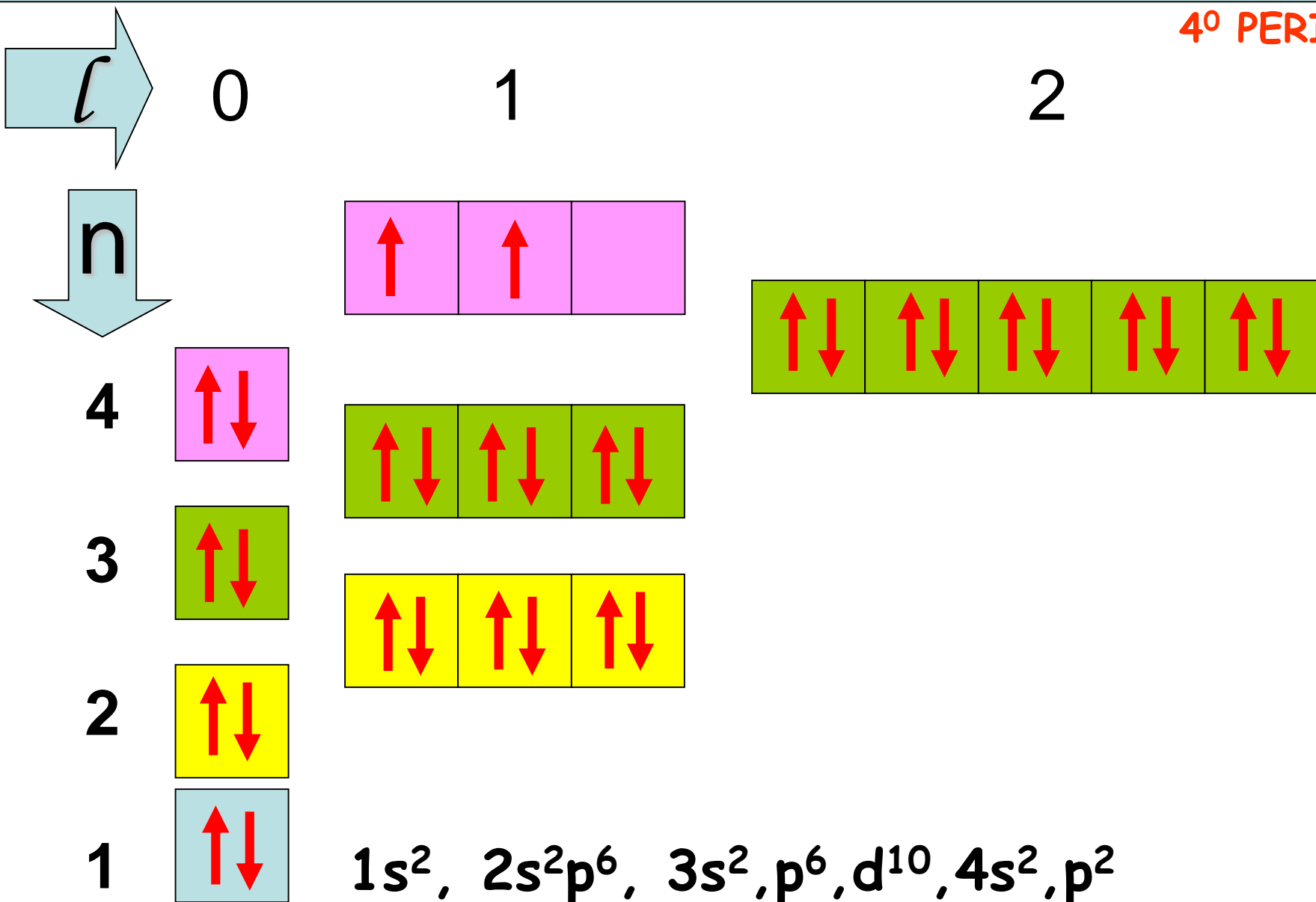


$Z = 32$

Germanio

simbolo: *Ge*

4^o PERIODO

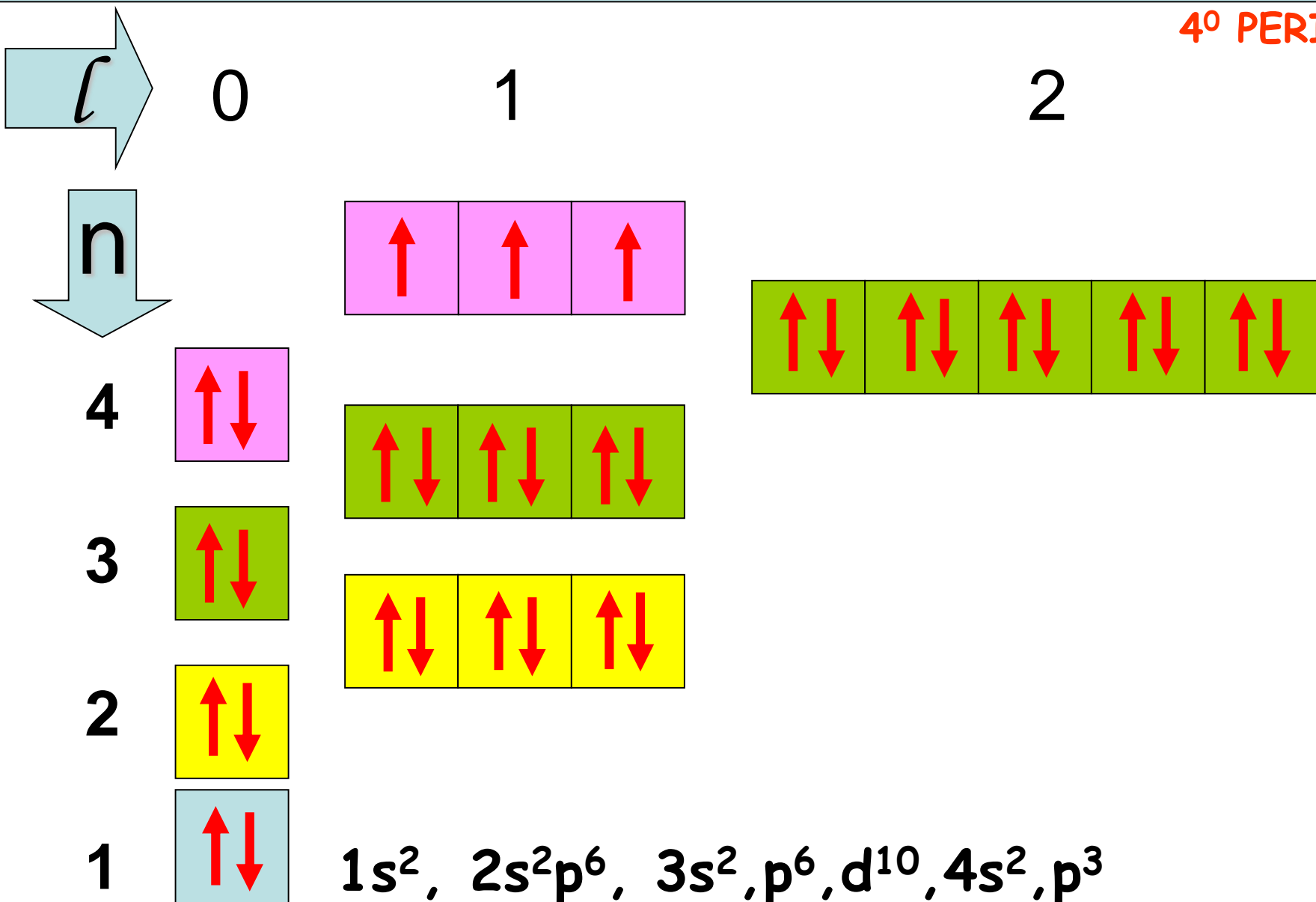


$Z = 33$

Arsenico

simbolo: As

4^o PERIODO

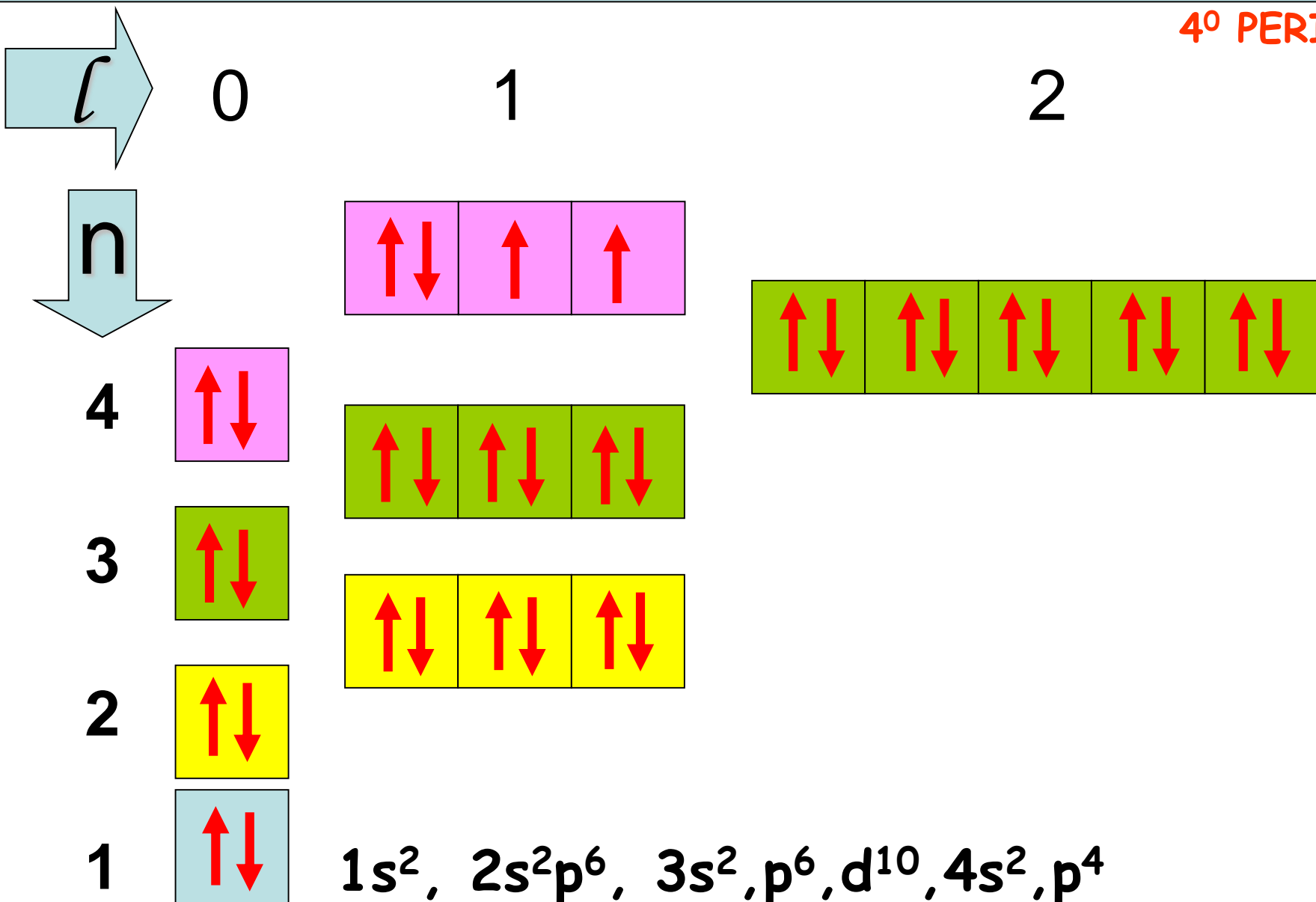


$Z = 34$

Selenio

simbolo: *Se*

4^o PERIODO

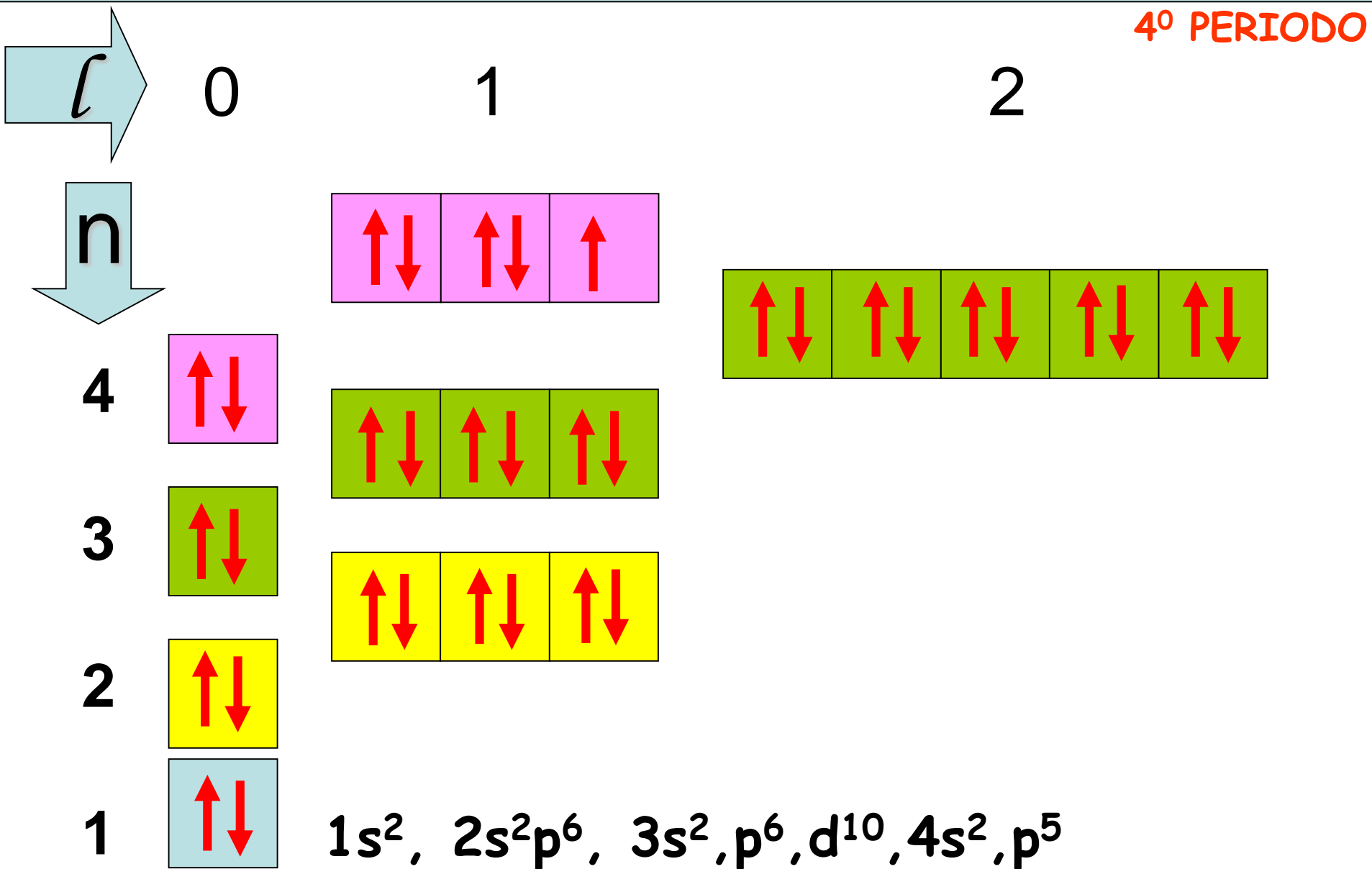


$Z = 35$

Bromo

simbolo: Br

4^o PERIODO

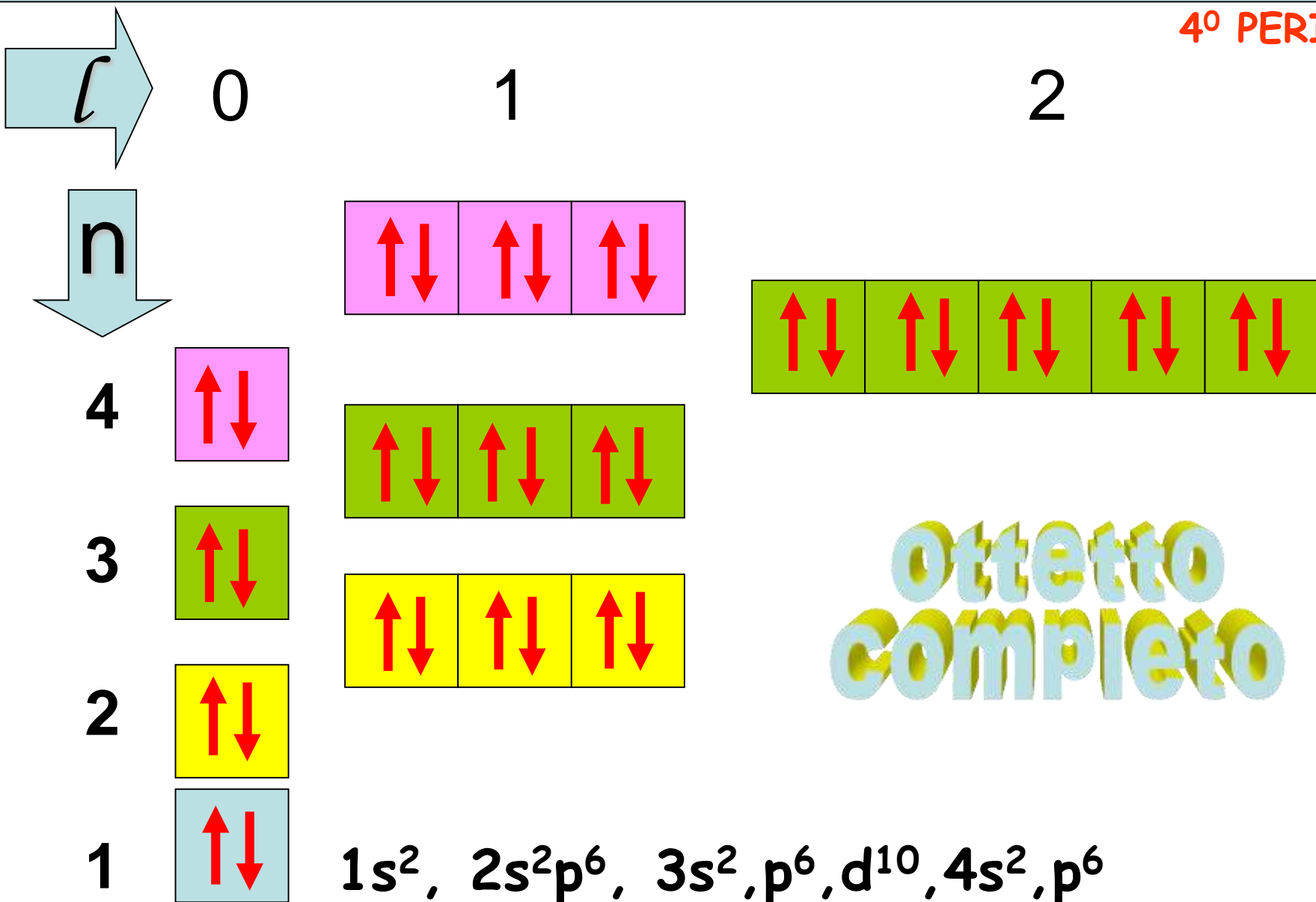


Z = 36

Krypton

simbolo: Kr

4^o PERIODO



Regola dell'OTTETTO

- Il livello più esterno - qualunque esso sia, non può ospitare più di 8 elettroni i quali si distribuiscono tra l'orbitale s e i 3 orbitali p
(esclusi H e He, livello 1^o: solo l'orbitale s)
- Gli elementi dell' VIII GRUPPO vengono definiti GAS NOBILI (avendo l'ottetto completo non reagiscono: He e non He₂,...)

Tutti gli atomi tendono a raggiungere la stabilità di un gas nobile ossia a mostrare un livello esterno completo

Tavola periodica degli elementi (1860)

Elementi organizzati in base al numero atomico e
alle loro caratteristiche chimico-fisiche

PERIODI

incasellati in ordine di
numero atomico Z crescente
 in file **ORIZZONTALI**
 andando a capo quando inizia
 il riempimento di un
 nuovo livello energetico

	IA																	VIIIA	
1		IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA		
2																			
3			IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB	IXB	XB							
4																			
5																			
6																			
7																			

Gli elementi di uno stesso gruppo hanno la stessa CONF. ELETTR. ESTERNA
 ovvero lo stesso numero di e^- nel livello energetico esterno o guscio di valenza
 (elettroni di valenza)

BLOCCO s

BLOCCO p

orbitali s

orbitali p

orbitali d

BLOCCO d

H																He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	d ¹	d ²	d ³	d ⁴	d ⁵	d ⁶	d ⁷	d ⁸	d ⁹	d ¹⁰	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	Ku														
s ¹	s ²	<u>ELEMENTI di TRANSIZIONE</u>										p ¹	p ²	p ³	p ⁴	p ⁵	p ⁶

Lantanidi

Attiniti

orbitali f

BLOCCO f

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw
f ¹	f ²	f ³	f ⁴	f ⁵	f ⁶	f ⁷	f ⁸	f ⁹	f ¹⁰	f ¹¹	f ¹²	f ¹³	f ¹⁴