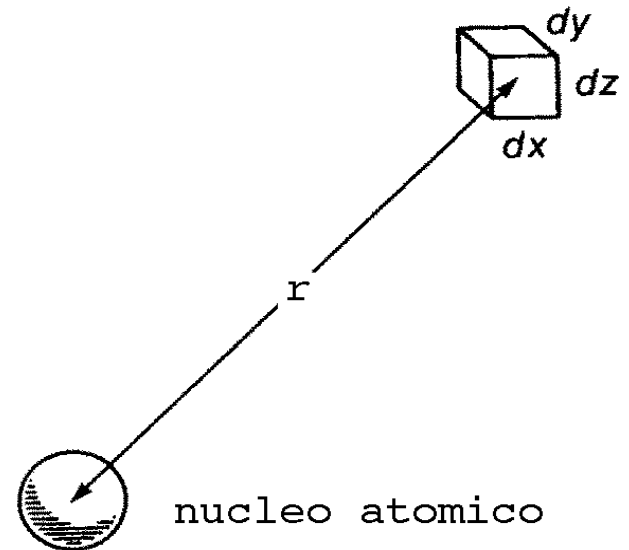


Struttura dell'atomo e la meccanica quantistica

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U_{(x)} \psi = E \psi$$

- Dove:
 - Ψ = funzione d'onda
 - $U_{(x)}$ = Energia potenziale
 - E = energia totale del sistema



Orbitali atomici e numeri quantici

- Secondo la meccanica quantistica ogni elettrone in un atomo è descritto da una funzione d'onda $\Psi(x,y,z)$ che dà la probabilità di trovare l'elettrone nei vari punti nello spazio.
- $\Psi(x,y,z)$ è una funzione d'onda che descrive la particella, ma in sé non ha un significato fisico, è solo un artificio matematico.
- Una funzione d'onda di un elettrone in un atomo è chiamata orbitale atomico e può essere descritto qualitativamente come la regione dello spazio attorno al nucleo dove è maggiore la probabilità di trovare l'elettrone.

Orbitali atomici e numeri quantici

- Un orbitale atomico è definito da tre numeri quantici (n, ℓ, m_ℓ) che formalmente sono una conseguenza matematica della soluzione dell'equazione di Schrodinger.
- L'elettrone è poi caratterizzato da un quarto numero quantico, m_s , legato al moto di spin dell'elettrone (rotazione attorno all'asse)

Numero quantico principale n

- determina l'energia dell'elettrone e può assumere qualsiasi valore intero positivo:

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

- Il numero quantico n determina anche la dimensione dell'orbitale: più grande è n più grande è l'orbitale. Orbitali con lo stesso numero quantico n si dice che appartengono allo stesso strato elettronico.

Numero quantico del momento angolare ℓ

- È detto anche numero quantico azimutale e distingue la forma di orbitali con lo stesso n .
- Per ogni dato n , ℓ può assumere tutti i valori interi compresi tra 0 e $n-1$

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

- ciascuno dei quali ha una diversa forma cioè una diversa distribuzione di probabilità nello spazio
- ℓ diversi orbitali sono indicati con le seguenti lettere:

lettera	s	p	d	f	g
ℓ	0	1	2	3	4

- Gli orbitali vengono indicati scrivendo prima il numero principale n (1,2,3,...) e poi la lettera corrispondente al numero quantico l (s, p, d, f, ...).
- Orbitali aventi lo stesso n e diverso l si dice che appartengono allo stesso sottostrato o stesso sottolivello.

• Esempi:

$n=1$	$l=0$	1s
$n=2$	$l=0$	2s
	$l=1$	2p
$n=3$	$l=0$	3s
	$l=1$	3p
	$l=2$	3d
$n=4$	$l=0$	4s
	$l=1$	4p
	$l=2$	4d
	$l=3$	4f

Numero quantico del momento magnetico m_ℓ

- Determina l'orientamento spaziale di orbitali con n e ℓ definiti, cioè con dimensione e forma definite.
- Per ogni dato ℓ , m_ℓ può assumere tutti i valori interi compresi tra $-\ell$ e $+\ell$, cioè

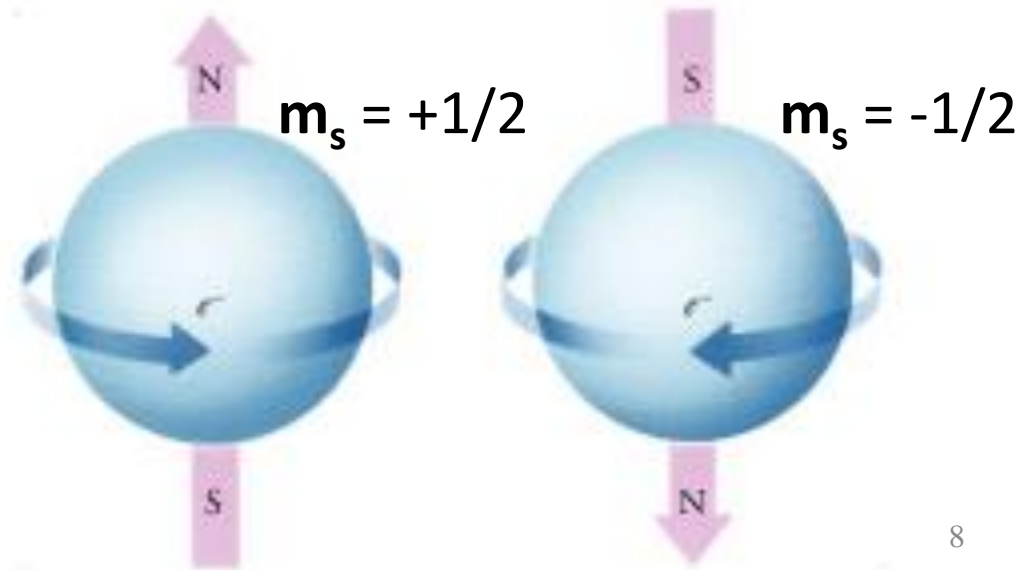
$$m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$$

$\ell=0$	s	$m_\ell=0$	1 orbitale s
$\ell=1$	p	$m_\ell=-1, 0, +1$	3 orbitali p
$\ell=2$	d	$m_\ell=-2, -1, 0, +1, +2$	5 orbitali d
$\ell=3$	f	$m_\ell=-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7 orbitali f

- Orbitali con lo stesso ℓ ma diverso m_ℓ hanno la stessa forma ma diversa orientazione nello spazio.
- Per un dato ℓ sono possibili $2\ell + 1$ orientazioni diverse

Numero quantico di spin m_s

- Determina le due possibili orientazioni dell'asse di spin di un elettrone e può assumere i valori $m_s = +1/2$ e $m_s = -1/2$
- Un elettrone si comporta come la terra ruotando intorno ad un asse e il valore di m_s determina il verso di rotazione.



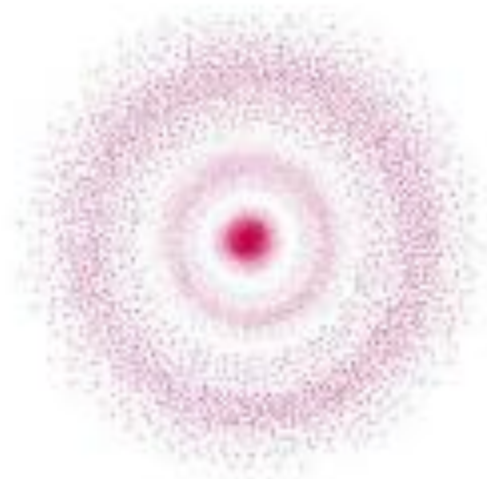
Orbitali s



(a) $1s$

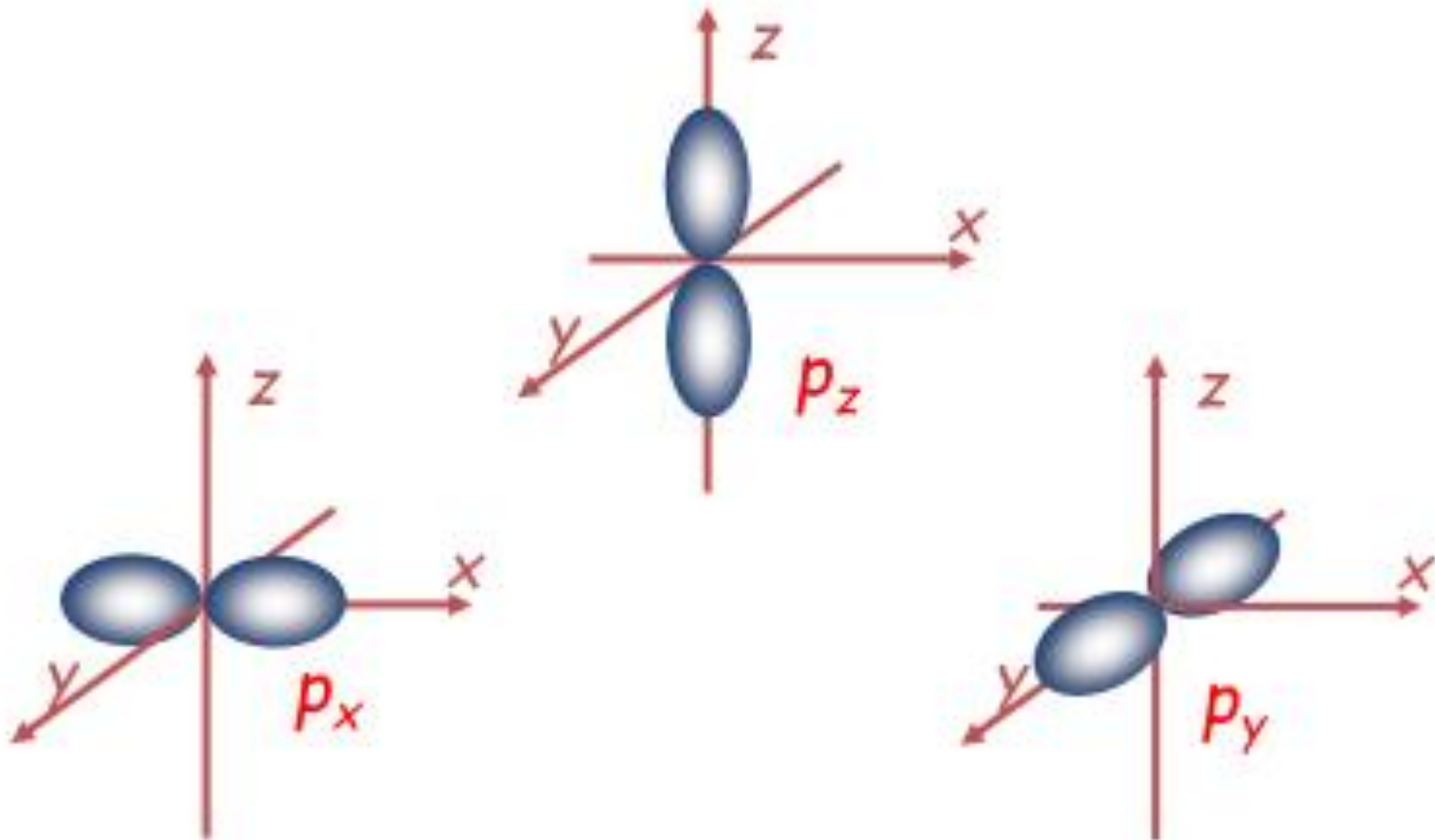


(b) $2s$



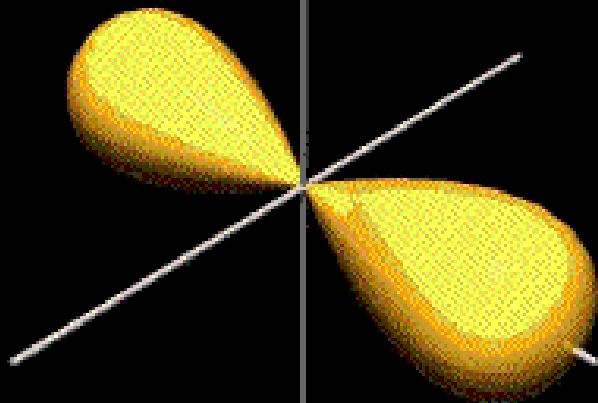
(c) $3s$

Orbitali p

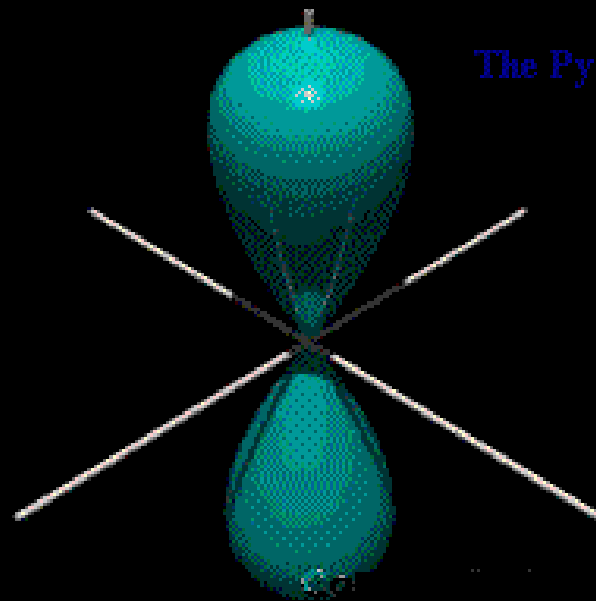


Orbitali p

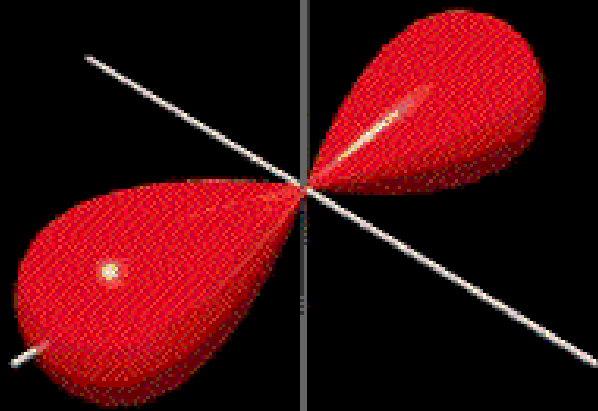
The P_x orbital



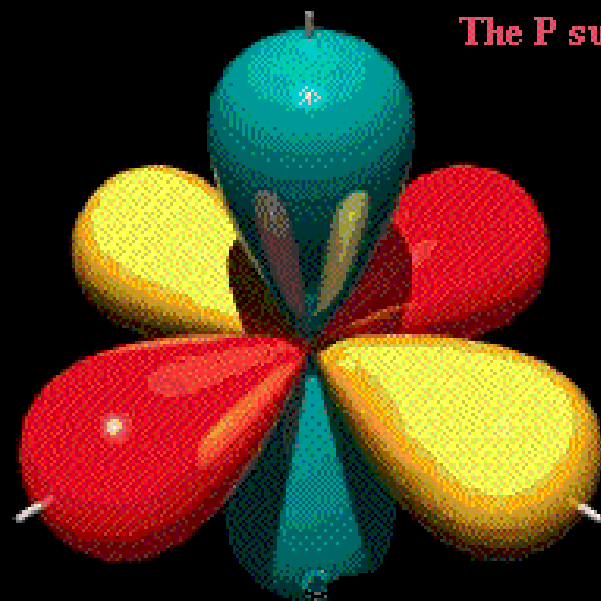
The P_y orbital



The P_z orbital

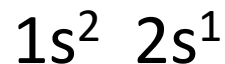


The P sub level



Configurazioni elettroniche di atomi polielettronici

- Una configurazione elettronica di un atomo è una particolare distribuzione degli elettroni fra i vari sottostrati ovvero fra i vari orbitali senza la specificazione degli m_l .
- Essa è indicata dalla successione dei simboli dei sottostrati con un indice in alto a destra che indica il numero di elettroni presenti nel sottostrato .
- Ad esempio una configurazione per l'atomo di litio ($Z = 3$ e quindi 3 elettroni) è



- Si fa spesso uso di una rappresentazione grafica in cui ogni orbitale è rappresentato da un cerchio (o da un quadrato) e sono riportati tutti gli orbitali possibili per ogni sottostrato.
- La presenza di un elettrone in un orbitale è indicata da una freccia che punta verso l'alto per $m_s = +1/2$ e verso il basso per $m_s = -1/2$.

Il principio di esclusioni di Pauli

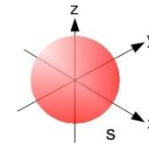
- Non tutte le possibili configurazioni elettroniche sono fisicamente permesse.
- Ciò è regolato dal principio di esclusioni di Pauli che afferma che due elettroni in un atomo non possono avere tutti e quattro i numeri quantici uguali.
- Poiché un elettrone in un dato orbitale ha i numeri quantici n , l e m_l fissati, ne segue che il restante numero quantico m_s può assumere solo i valori $m_s = +1/2$ e $m_s = -1/2$, quindi un dato orbitale può essere occupato al massimo da due elettroni con spin opposto.
- Ad esempio l'orbitale $1s$ è caratterizzato dai numeri quantici $n = 1$, $l = 0$ e $m_l = 0$, e può contenere solo due elettroni con $m_s = +1/2$ e $m_s = -1/2$.
- Ciò può essere rappresentato graficamente da un cerchietto con due frecce con verso opposto



numero massimo di elettroni nei vari sottostati

$\ell=0$

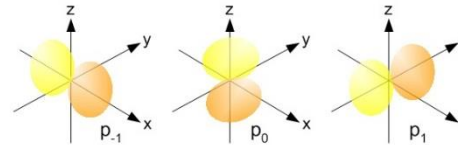
s



2 e⁻

$\ell=1$

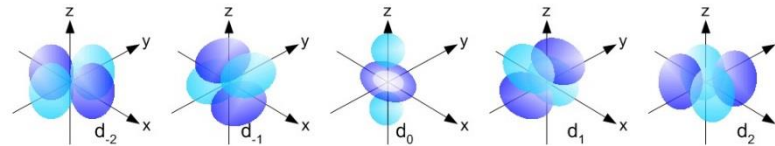
p



6 e⁻

$\ell=2$

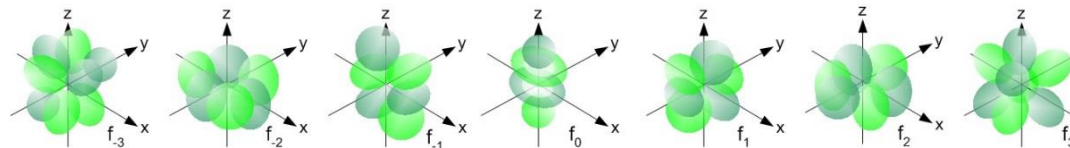
d



10 e⁻

$\ell=3$

f

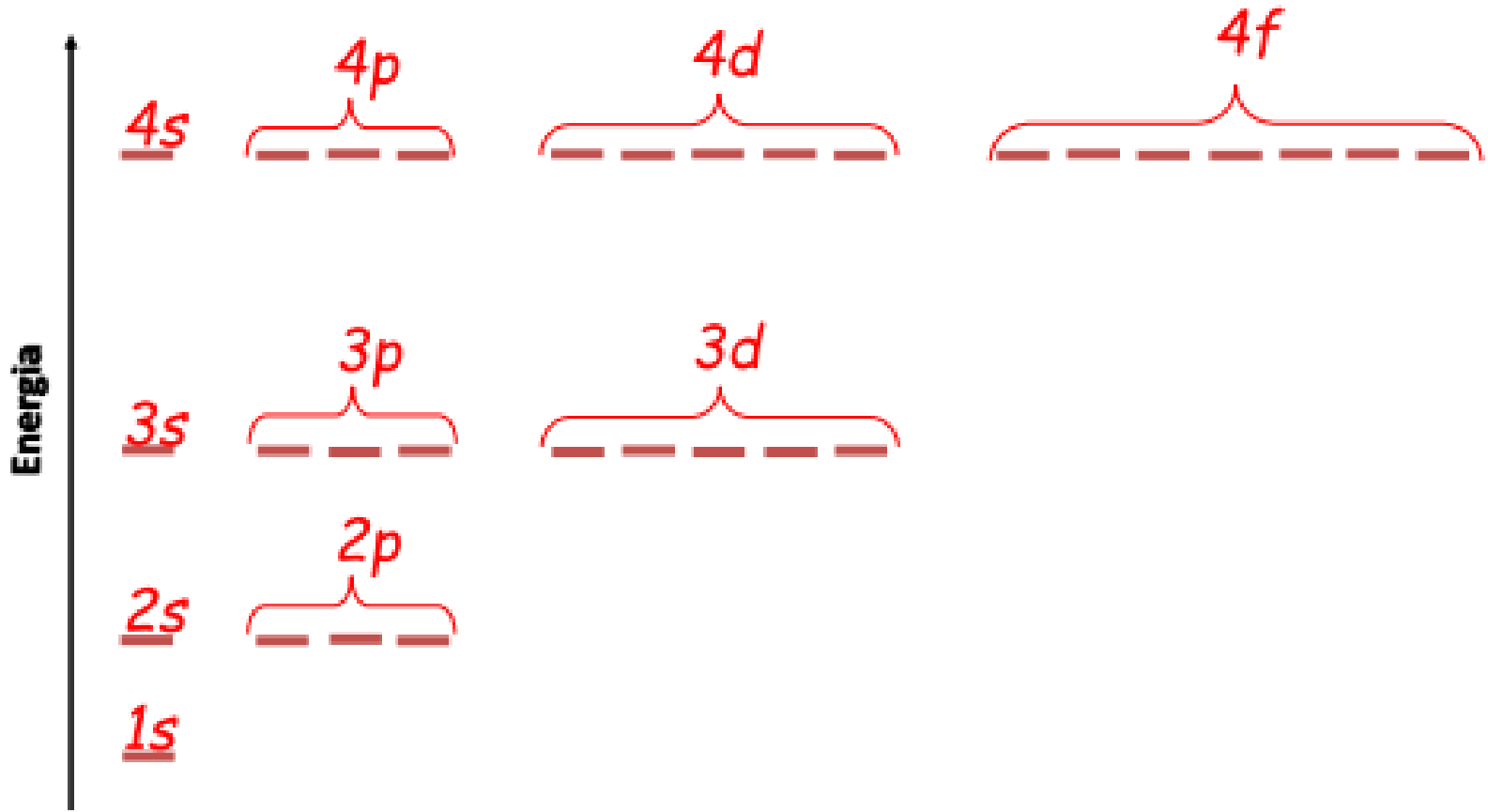


14 e⁻

Principio di Aufbau

- Per un atomo vi sono infinite configurazioni elettroniche possibili. Fra queste, una corrisponde allo stato a più bassa energia dell'atomo, nota come **stato fondamentale**.
- Tutte le altre configurazioni corrispondono a stati a più alta energia noti come **stati eccitati**.
- Per determinare lo stato fondamentale di un dato atomo si riempiono gli orbitali in ordine di energia crescente compatibilmente con il principio di esclusione di Pauli.

- L'applicazione di questo schema per ricavare le configurazioni elettroniche degli stati fondamentali degli atomi è nota come Principio di Aufbau o della costruzione sequenziale.



Configurazioni elettroniche

- Ritorniamo ora al riempimento successivo dei sottostrati fra gli elementi finora considerati, l'elio He ed il neon Ne hanno gli strati $n = 1$ e $n = 2$ completi cosa che conferisce a queste configurazioni una particolare stabilità e rende gli elementi non reattivi

He $Z=2$ $1s^2$

Ne $Z=10$ $1s^2 2s^2 2p^6$

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

- Nel 1869 i chimici Mendeleev (russo) e Meyer (tedesco) indipendentemente trovarono che ordinando gli elementi in ordine di peso atomico e disponendoli in file orizzontali una sopra l'altra, gli elementi di ogni colonna avevano proprietà simili. Oggi, in maniera più corretta, gli elementi sono disposti per numero atomico, Z , crescente.
- Tale disposizione degli elementi è nota come tavola periodica:
 - un periodo è composto dagli elementi di una fila orizzontale
 - un gruppo è costituito dagli elementi di una colonna verticale
- La tabella è costituita da 18 gruppi più i 14 elementi di transizione interna (lantanidi e attinidi).

La Tavola Periodica

- organizza i 114 elementi in funzione delle loro proprietà strutturali e di reattività, che si ripetono con periodicità

Atomic number	1	2	3	4	9	10	11	12	17	18	19	20
Symbol	H	He	Li	Be	F	Ne	Na	Mg	Cl	Ar	K	Ca
		Inert gas	Soft, reactive metal			Inert gas	Soft, reactive metal			Inert gas	Soft, reactive metal	

Informazioni disponibili

NUMERO ATOMICO	90	Th	SIMBOLO ATOMICO
NOME	Thorium		
MASSA ATOMICA	232,0381	1,3	ELETTRONEGATIVITÀ
	1842	~11,7	
	~4500	4	
	(Rn)6d²7s²		Configurazione elettronica

Main-group elements

s block		Transition elements										p block					
1	2											13	14	15	16	17	18
1 H												5	6	7	8	9	10
3 Li	4 Be											B	C	N	O	F	Ne
11 Na	12 Mg											13	14	15	16	17	18
19 K	20 Ca	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
37 Rb	38 Sr	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
55 Cs	56 Ba	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
87 Fr	88 Ra	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
		La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
		Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									

Inner-transition elements

f block													
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

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

- E' possibile notare che le configurazioni elettroniche degli atomi viste finora seguono un preciso schema che permette di interpretare la tavola periodica.
- Nella tavola periodica si possono distinguere sette righe note come periodi e diciotto colonne note come gruppi.

The diagram shows a standard periodic table with three callout boxes. A blue box labeled 'orbitali s' points to the first column (Group 1). A yellow box labeled 'orbitali p' points to the p-block elements (Groups 13-18). A purple box labeled 'orbitali d' points to the d-block transition metals (Groups 3-10).

H																			He
Li	Be												B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Ra		
Fr	Ra	Ac																	

The diagram shows the f-block elements, which are the lanthanide and actinide series, highlighted in green. A green callout box labeled 'orbitali f' points to this block.

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

La Tavola Periodica

- Le colonne sono i gruppi (da 1 a 18).
- Le righe sono i periodi.
- Metalli a sinistra (i più abbondanti come numero)
- Non-metalli in alto a destra.
- Metalloidi: elementi con proprietà simili a metalli e non metalli, all'interfaccia

La Tavola Periodica

- Nomi speciali ad alcuni Gruppi che indicano le proprietà degli appartenenti al gruppo
- Gruppo 1: Metalli alcalini.
- Gruppo 2: Metalli alcalino terrosi.
- Gruppo 16: Calcogeni.
- Gruppo 17: Alogeni.
- Gruppo 18: Gas Nobili.

Main-group elements

s block		Transition elements										p block					
1		d block										18					
1s	2																
H	He																
3 4												2p					
Li	Be											5	6	7	8	9	10
11 12		3d										3p					
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
37 38												4p					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
55 56												5p					
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
87 88												6p					
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	81	82	83	84	85	86
106 107												7p					
Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	110	111	112	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

Inner-transition elements

f block														
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

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

- Uno strato (o guscio) è stato definito come un gruppo di orbitali aventi lo stesso n . Questo implica che le posizioni medie degli elettroni in ogni guscio sono vicine fra loro, ma lontane da quelle di orbitali con n diverso.
- Gli elettroni di valenza sono quelli che occupano lo strato più esterno, quello che viene dopo la configurazione del gas nobile che lo precede.
- Gli elettroni dei gusci più interni sono in media più vicini al nucleo ed hanno energie più basse (sono più fortemente legati) degli elettroni più esterni. Gli elettroni appartenenti ai gusci più interni sono detti elettroni di core.

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

periodica

- Gli elementi successivi ai gas nobili in un gruppo qualsiasi della tavola periodica sono costituiti da un core o nocciolo (tipo gas nobile) più una configurazione analoga per i restanti elettroni di valenza.
- Elementi dello stesso gruppo (colonna) della tavola periodica hanno configurazioni elettroniche di valenza analoghe. Le proprietà e il comportamento chimico di un atomo dipendono proprio dalla configurazione elettronica di valenza.

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

- Il raggruppamento di otto elettroni s^2p^6 nell'ultimo livello di energia, è una configurazione di grande stabilità che prende il nome di **ottetto**. I gas nobili (eccetto l'elio, He) hanno questa struttura elettronica nello strato più esterno.
- La regola dell'ottetto ci dice che nelle reazioni chimiche gli elementi perderanno, condivideranno o guadagneranno il numero minimo di elettroni necessari per raggiungere la configurazione dei gas nobili vicini.

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

- La maggior parte dei cationi derivano dagli atomi degli elementi metallici dei gruppi principali togliendo tutti gli elettroni di valenza di modo che essi assumano una configurazione elettronica a gas nobile.
- Le energie di ionizzazione successive aumentano progressivamente ma rimangono accettabilmente basse fino a che si rimuovono solo elettroni di valenza.

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

- I non metalli formano anioni con carica pari al numero del gruppo meno 8

The periodic table is divided into several blocks based on the subshell being filled:

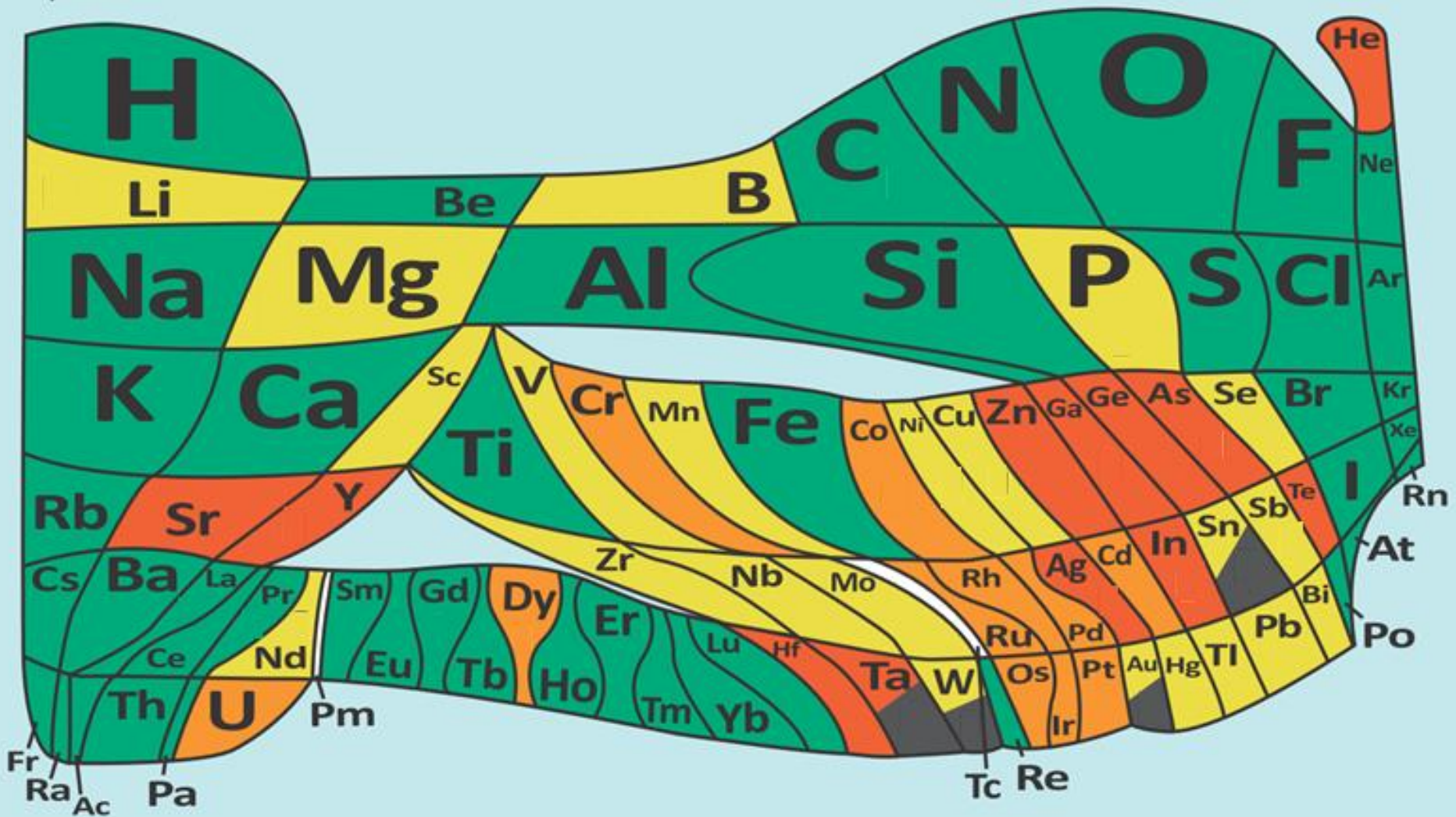
- s block:** Groups 1 and 2 (Li, Be, Na, Mg, K, Ca, Rb, Sr, Cs, Ba, Fr, Ra).
- p block:** Groups 13-18 (B, C, N, O, F, Ne, Si, P, S, Cl, Ar, Ge, As, Se, Br, Kr, Sn, Sb, Te, I, Xe, Pb, Bi, Po, At, Rn).
- d block:** Transition elements (Groups 3-10, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg).
- f block:** Inner-transition elements (Groups 3-10, 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, Lr).

The p block is highlighted with a red circle in the image.

Main-group elements																		
s block		Transition elements										p block						
1	2											13	14	15	16	17	18	
1s												2s					2p	1s
H	He											B	C	N	O	F	Ne	
3s	3d	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
Li	Be	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
11	12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Na	Mg	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
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	111	112							
Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										

Inner-transition elements													
f block													
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

Abbondanza relativa



A grave rischio entro 100 anni

Sempre più a rischio per il crescente utilizzo

Disponibilità limitata, a rischio in futuro

Piena disponibilità

Di sintesi

Provenienti da minerali in zone di conflitto

Presenti negli smartphone