

Numeri quantici

Numero quantico principale n :

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

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

Numero quantico del momento angolare ℓ :

Determina la forma di orbitali con lo stesso n .

Per ogni dato n , ℓ può assumere tutti i valori interi compresi tra 0 e $n-1$

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

Numero quantico magnetico m

Determina l'orientamento spaziale di orbitali con n e ℓ definiti.

Per ogni dato ℓ m_ℓ può assumere tutti i valori interi compresi tra $-\ell$ e $+\ell$, cioè

$$m = -\ell, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +\ell$$

L'elettrone è poi caratterizzato da un quarto numero quantico **m_s legato al moto di spin** dell'elettrone (rotazione attorno all'asse) e può assumere i valori **$m_s = +1/2$ e $m_s = -1/2$**

L'elettrone appartenente ad un atomo è caratterizzato da **quattro numeri quantici**: tre identificano l'orbitale (n, l, m_l) e uno la sua rotazione (m_s)

orbitale \rightarrow $(n / m_l) m_s$ \leftarrow momento di spin

m_s numero quantico intrinseco può assumere solo due valori $m_s = +\frac{1}{2}$ oppure $-\frac{1}{2}$

Principio di esclusione di Pauli: due e^- **non** possono essere caratterizzati dagli **stessi** 4 numeri quantici

sullo stesso orbitale possono stare al massimo 2 e^- , e devono avere spin opposto (antiparallelo)

Sullo strato n esistono n^2 orbitali (sottostrati)

Lo strato n può essere occupato al massimo da $2n^2$ elettroni

Hund: Nello stato fondamentale l'atomo adotta la configurazione con il massimo numero di e^- spaiati e con spin parallelo.

Orbitali

Gli orbitali vengono indicati scrivendo prima il numero principale n (1,2,3,....)
Ai diversi valori di l si associa per convenzione una lettera (s, p, d, f,).

Per esempio:

Per $n=1$ si può avere	$l=0$	cioè l'orbitale 1s
Per $n=2$ si può avere	$l=0$	cioè l'orbitale 2s
	$l=1$	cioè l'orbitale 2p
Per $n=3$ si può avere	$l=0$	cioè l'orbitale 3s
	$l=1$	cioè l'orbitale 3p
	$l=2$	cioè l'orbitale 3d
Per $n=4$ si può avere	$l=0$	cioè l'orbitale 4s
	$l=1$	cioè l'orbitale 4p
	$l=2$	cioè l'orbitale 4d
	$l=3$	cioè l'orbitale 4f

Orbitali

Per ogni valore di l , il numero quantico m può assumere tutti i valori interi compresi tra $-l$ e $+l$.

Quindi:

$l=0$	s	$m_l=0$	1 orbitale s
$l=1$	p	$m_l=-1, 0, +1$	3 orbitali p
$l=2$	d	$m_l=-2, -1, 0, +1, +2$	5 orbitali d
$l=3$	f	$m_l=-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7 orbitali f

La gerarchia dei numeri quantici per gli orbitali atomici

Nome, simbolo (proprietà)	Valori permessi	Numeri quantici		
numero quantico principale, n (dimensione, energia)	numeri interi positivi (1, 2, 3, ...)	1	2	3
numero quantico del momento angolare, l (forma)	da 0 a $n - 1$	0	0, 1	0, 1, 2
numero quantico magnetico, m_l (orientamento)	$-l, \dots, 0, \dots, +l$	0	0, -1, +1	0, -1, 0, +1, +2, -2

FORMA DELL'ORBITALE

$l = 0 \rightarrow$ s sferica

$l = 1 \rightarrow$ p 2 lobi (manubrio)

$l = 2 \rightarrow$ d 4 lobi (quadrifoglio)

$l = 3 \rightarrow$ f (multilobata)

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

Forme degli orbitali

$$n = 1, \quad l = 0, \quad m = 0$$

1s

Orbitale sferico



$$n = 2 \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \quad m = 0 \\ l = 1 \left\{ \begin{array}{l} m = 1 \\ m = 0 \\ m = -1 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

2s

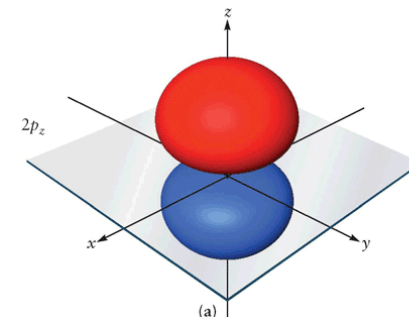


2p_x

2p_y

2p_z

FIGURA 5.8 Forma dei tre orbitali 2p con indicate le fasi e i piani nodali. Le isosuperfici in (a), (b) e (c) identificano i punti in cui l'ampiezza di ogni funzione d'onda è $\pm 0,2$ del massimo. (a) Orbitale 2p_z, (b) orbitale 2p_x, (c) orbitale 2p_y.



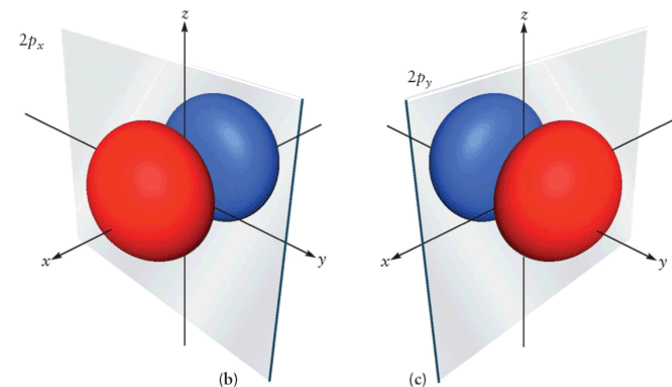
FORMA DELL'ORBITALE

$l = 0 \rightarrow$ s sferica

$l = 1 \rightarrow$ p 2 lobi (manubrio)

$l = 2 \rightarrow$ d 4 lobi (quadrifoglio)

$l = 3 \rightarrow$ f (multilobata)



Forme degli orbitali

$$m = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$$

$n = 3$

$l = 2$

$m = -2, -1, 0, +1, +2$

Orbitali d

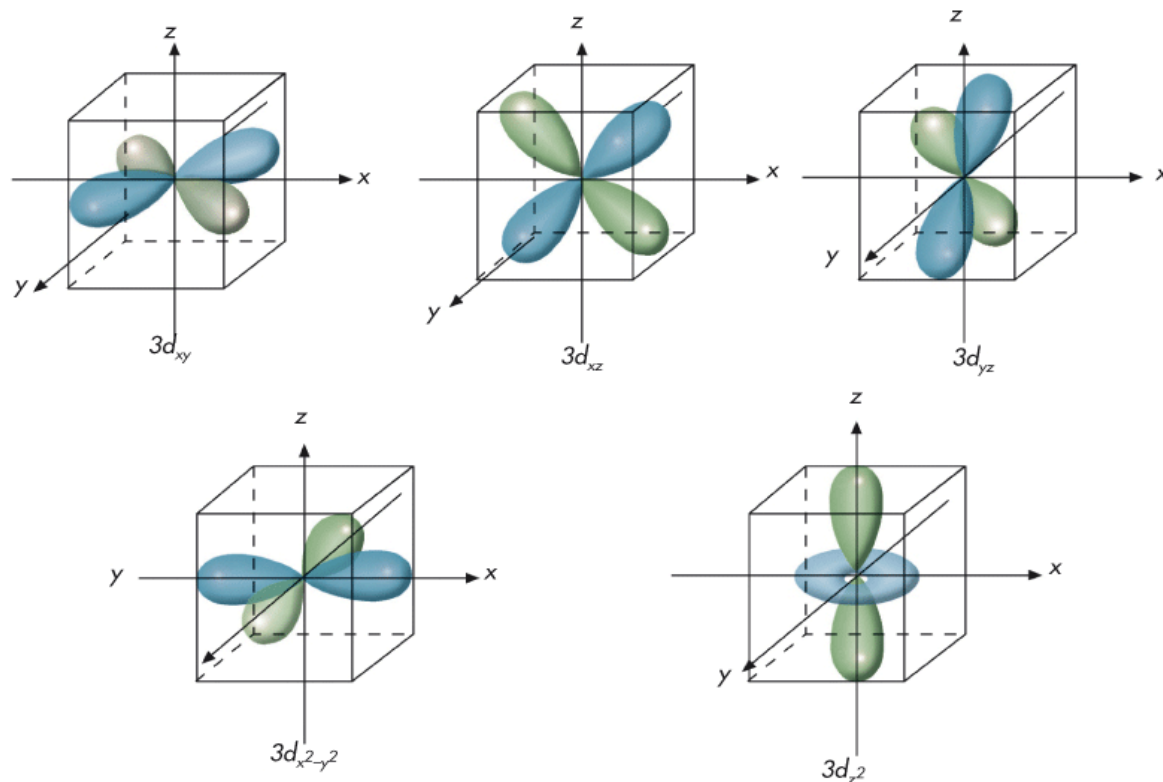


Figura 2.31

Rappresentazione dei 5 orbitali 3d secondo le loro superfici limite.

FORMA DELL'ORBITALE

$l = 0 \rightarrow$ s sferica

$l = 1 \rightarrow$ p 2 lobi (manubrio)

$l = 2 \rightarrow$ d 4 lobi (quadrifoglio)

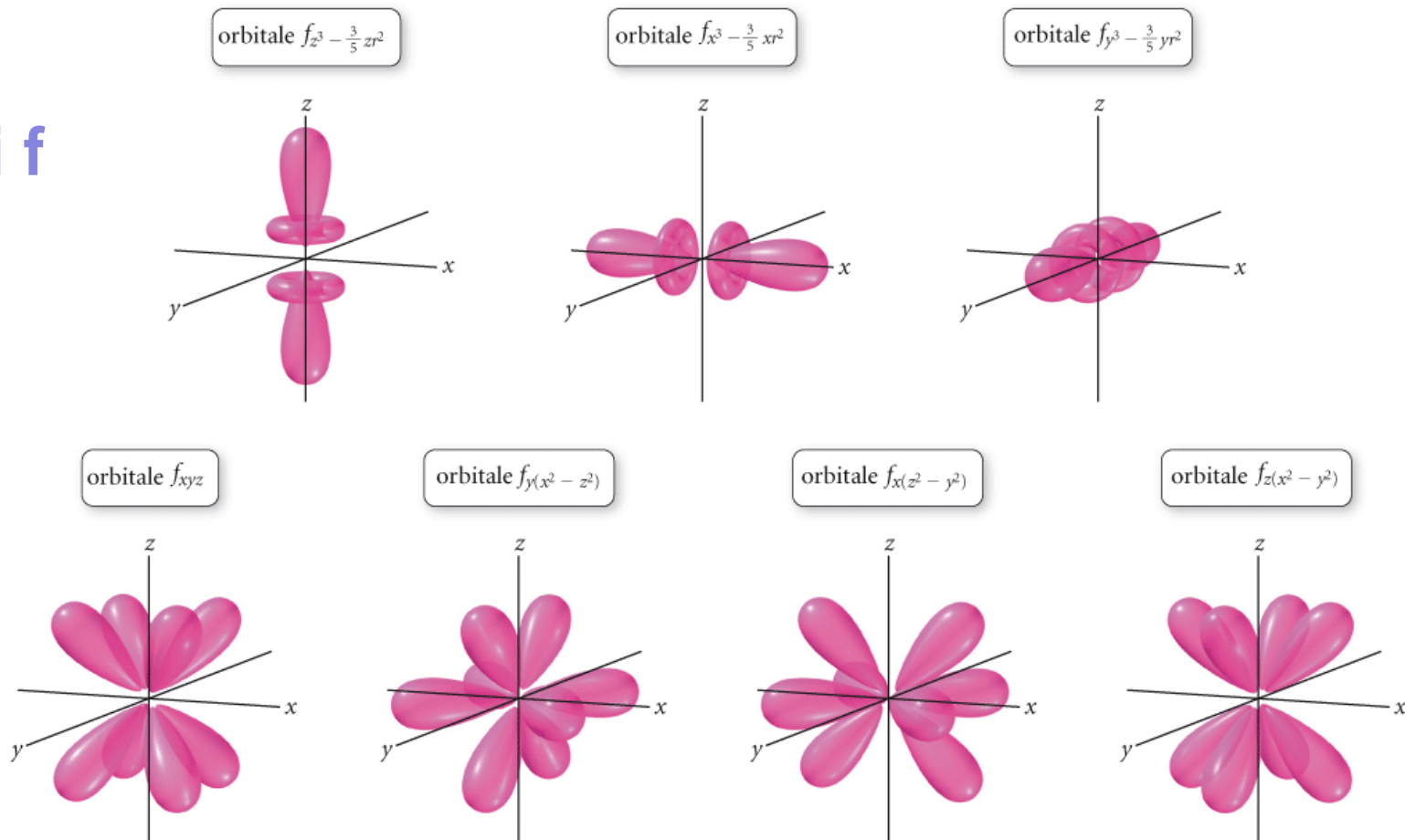
$l = 3 \rightarrow$ f (multilobata)

n = 4

l = 3

m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3

Orbitali f



▲ FIGURA 7.28 Gli orbitali 4f

FORMA DELL'ORBITALE

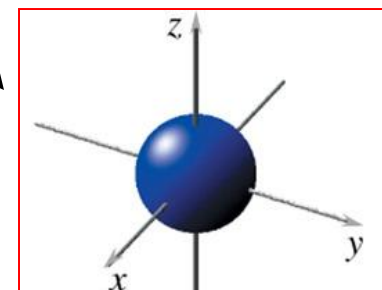
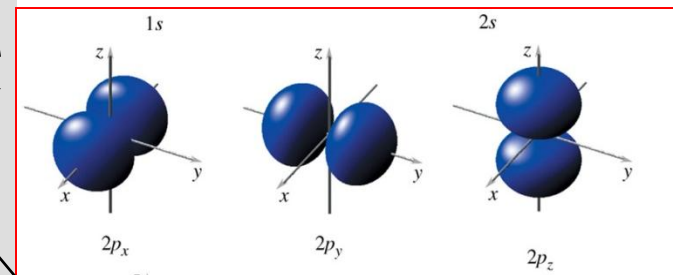
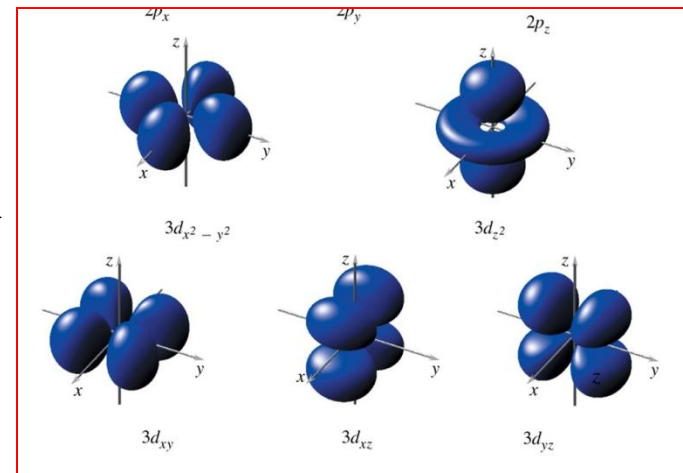
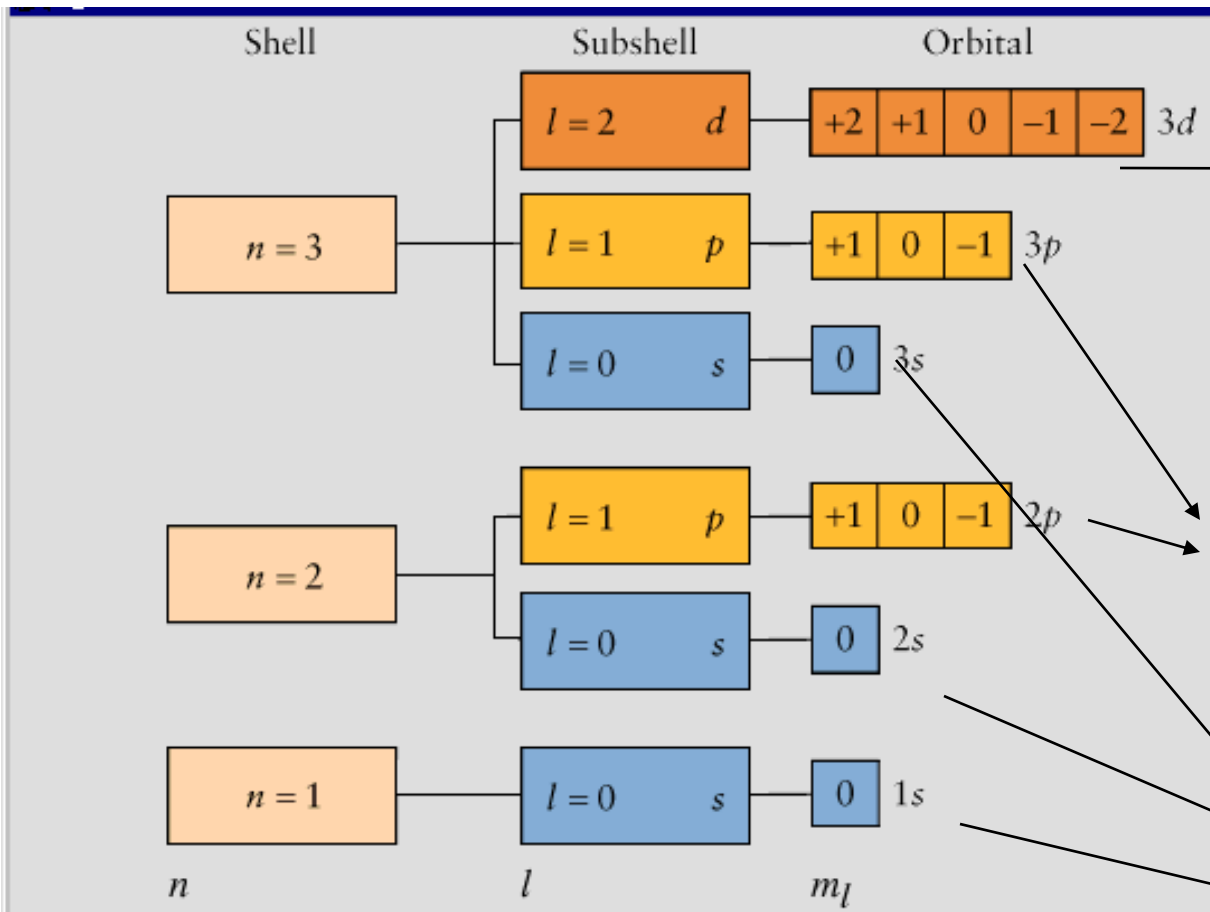
$l = 0 \rightarrow$ s sferica

$l = 1 \rightarrow$ p 2 lobi (manubrio)

$l = 2 \rightarrow$ d 4 lobi (quadrifoglio)

$l = 3 \rightarrow$ f (multilobata)

Orbitali nei primi tre livelli

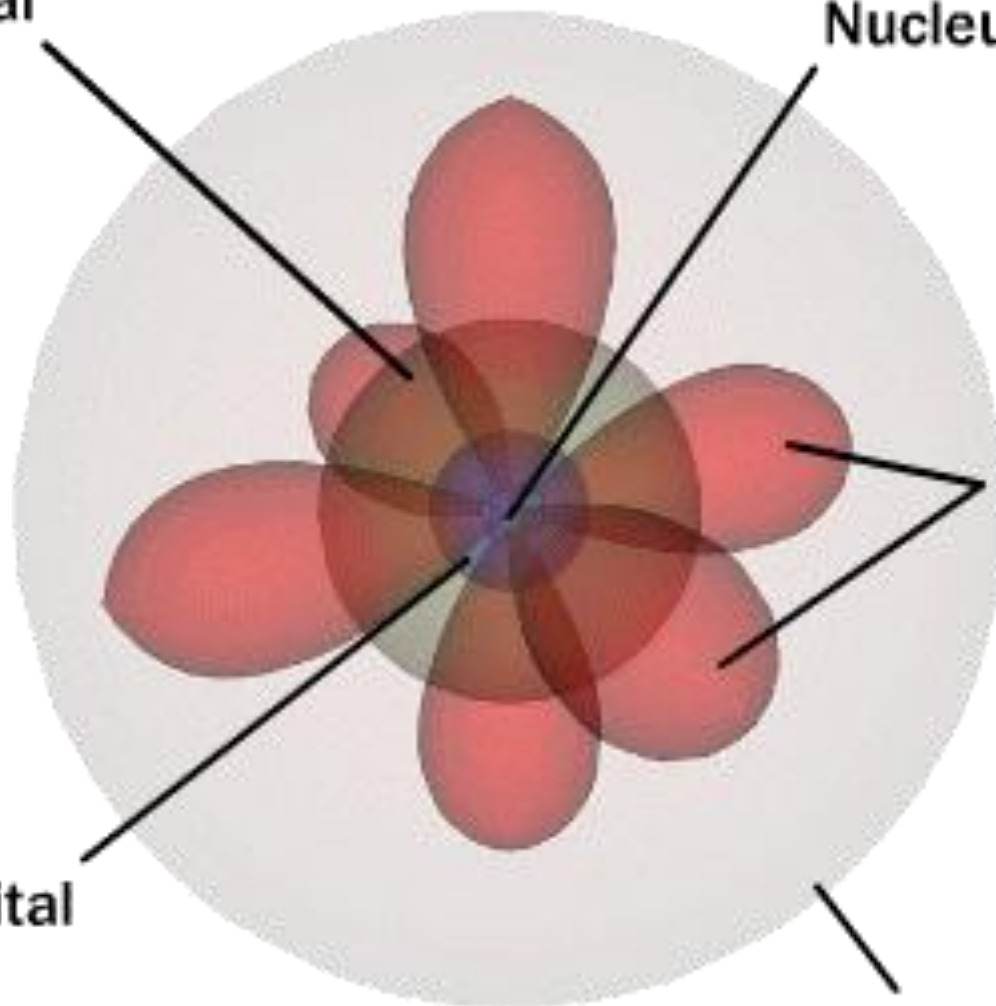


$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = -l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$$

2s orbital

Nucleus

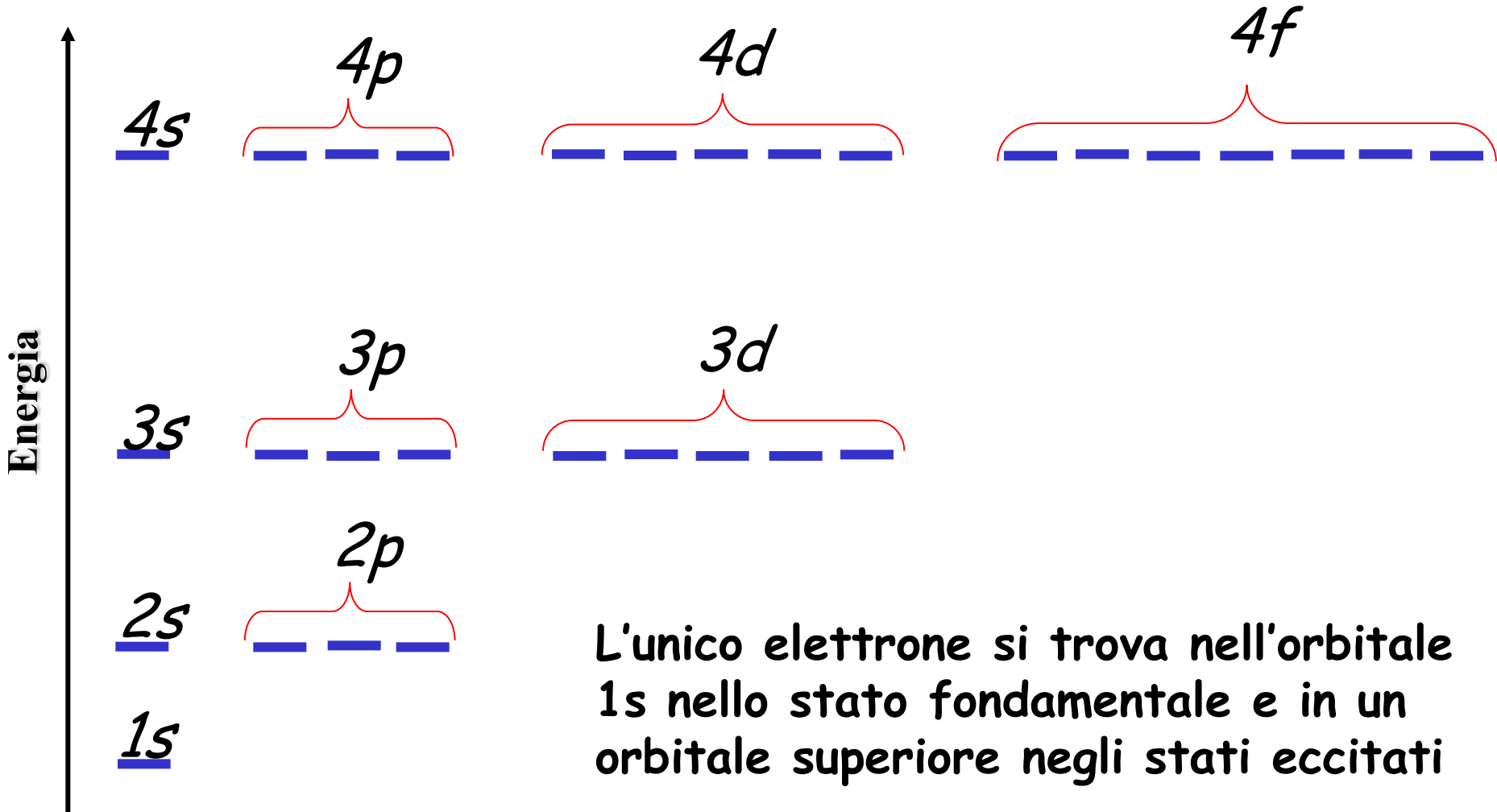


1s orbital

2p orbitals

3s orbital

Per l'atomo di idrogeno l'energia degli orbitali dipende solo da n



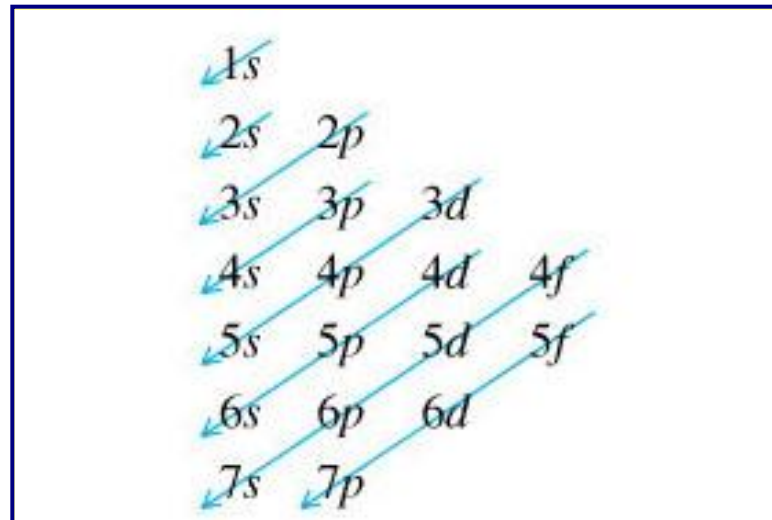
L'unico elettrone si trova nell'orbitale $1s$ nello stato fondamentale e in un orbitale superiore negli stati eccitati

Atomi polielettronici

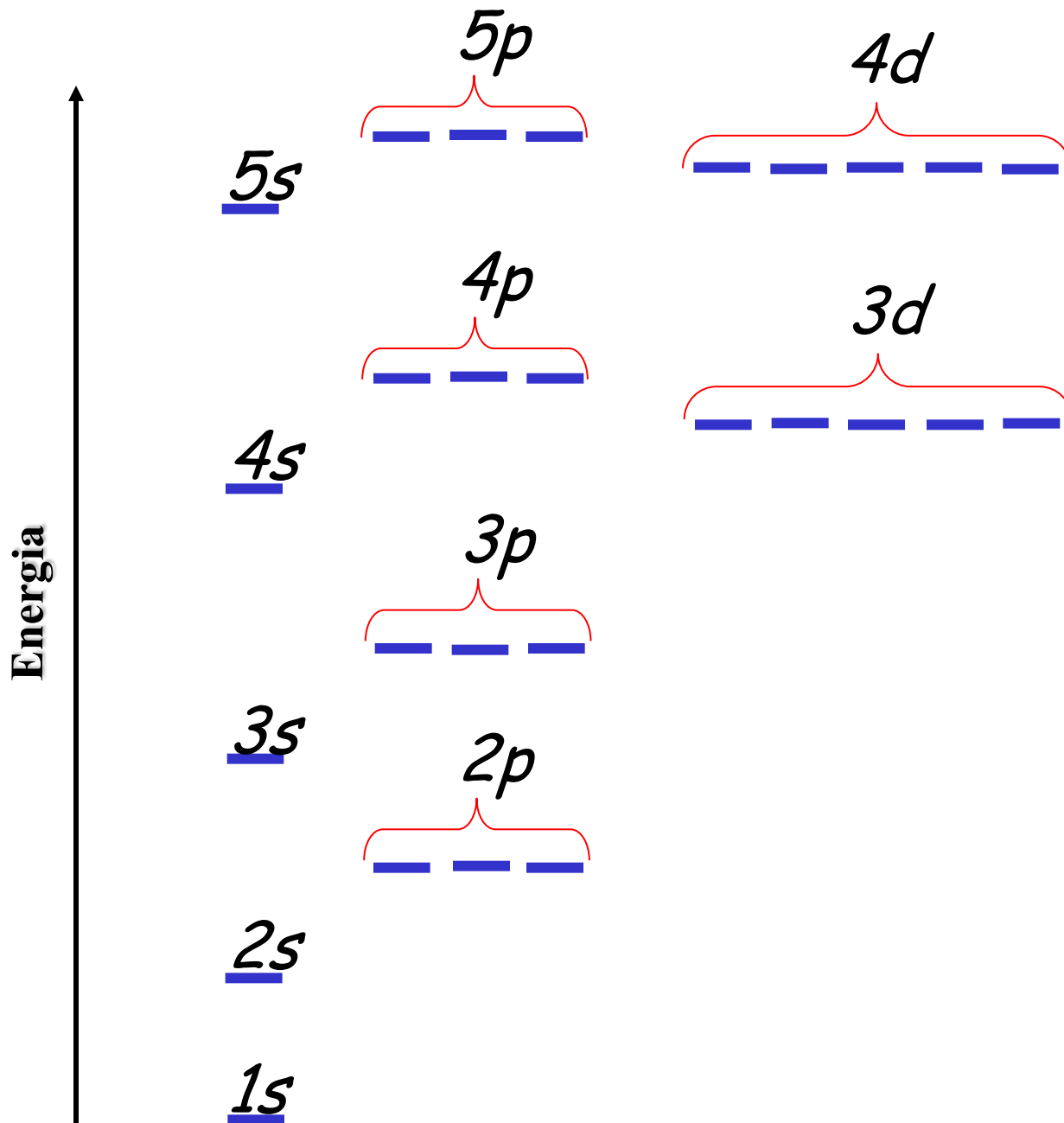
Per gli elementi con più di un elettrone **l'energia degli orbitali dipende anche dal numero quantico ℓ** , ma non da m .

Bisogna infatti considerare che esistono anche le interazioni repulsive tra gli elettroni, oltre alle forze di attrazione nucleo-elettrone.

Al crescere di n la dipendenza dell'energia da ℓ può essere così forte che orbitali di uno strato superiore possono essere più bassi di quelli dello strato inferiore con ℓ elevato:



Ordine di riempimento per un atomo polielettronico



L'elettrone appartenente ad un atomo è caratterizzato da **quattro numeri quantici**: tre identificano l'orbitale (n, l, m_l) e uno la sua rotazione (m_s)

orbitale \rightarrow $(n / m_l) m_s$ \leftarrow momento di spin

m_s numero quantico intrinseco può assumere solo due valori $m_s = +\frac{1}{2}$ oppure $-\frac{1}{2}$

Principio di esclusione di Pauli: due e^- **non** possono essere caratterizzati dagli **stessi** 4 numeri quantici

sullo stesso orbitale possono stare al massimo 2 e^- , e devono avere spin opposto (antiparallelo)

Sullo strato n esistono n^2 orbitali (sottostrati)

Lo strato n può essere occupato al massimo da $2n^2$ elettroni

Hund: Nello stato fondamentale l'atomo adotta la configurazione con il massimo numero di e^- spaiati e con spin parallelo.

Sullo strato n esistono n^2 orbitali (sottostrati)

Nome, simbolo (proprietà)	Valori permessi	Numeri quantici		
numero quantico principale, n (dimensione, energia)	numeri interi positivi (1, 2, 3, ...)	1	2	3
numero quantico del momento angolare, l (forma)	da 0 a $n - 1$	0	0, 1	0, 1, 2
numero quantico magnetico, m_l (orientamento)	$-l, \dots, 0, \dots, +l$	0	0, -1, +1	0, -1, 0, +1, +2, -2

Nel primo livello (strato) $n=1$ esiste UN SOLO ORBITALE ed è sferico ($l=0$)

Nel secondo livello $n=2$ esistono $2^2=4$ orbitali: Uno è sferico ($l=0$), e tre sono a due lobi ($l=1$)

Nel terzo livello $n=3$ esistono $3^2=9$ orbitali: Uno è sferico ($l=0$), tre sono a due lobi ($l=1$), e 5 sono a quadrifoglio ($l=2$)

- FORMA DELL'ORBITALE**
- $l = 0 \rightarrow s$ sferica
 - $l = 1 \rightarrow p$ 2 lobi (manubrio)
 - $l = 2 \rightarrow d$ 4 lobi (quadrifoglio)
 - $l = 3 \rightarrow f$ (multilobata)

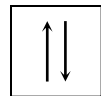
Configurazioni elettroniche di atomi polielettronici

Si può immaginare di costruire la struttura elettronica di un atomo collocando tutti gli elettroni uno dopo l'altro partendo dall'orbitale libero con l'energia più bassa.

1) **PAULI**: due elettroni di un dato orbitale non possono avere tutti e quattro i numeri quantici uguali.

Quindi un orbitale definito da una terna n , l ed m può ospitare solo elettroni che differiscono per il numero m_s $-1/2$ e $+1/2$.

$n=1$ $l=0$ $m=0$ orbitale $1s$ può contenere solo 2 elettroni



$m_s=+1/2$ e $m_s=-1/2$

2) **HUND**: gli orbitali con un dato valore di l devono essere occupati ciascuno con un elettrone con spin $+1/2$ e successivamente completati con il secondo elettrone di spin opposto.

Configurazione elettronica

*numero di elettroni
nell'orbitale*

1s²

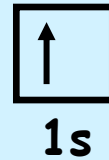
orbitale

Strato (indicato dal numero quantico n)

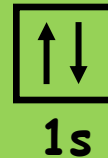
L'ordine delle energie dei sottostrati è dunque:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p

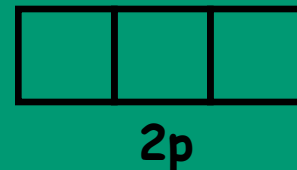
H Z=1 1s¹



He Z=2 1s²

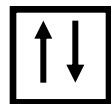


Li Z=3 1s² 2s¹

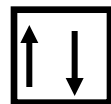


Per il carbonio e gli atomi successivi del secondo periodo si ha quindi:

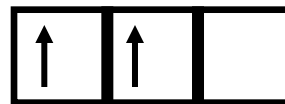
C **Z=6** $1s^2 2s^2 2p^2$



1s

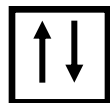


2s

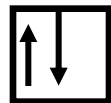


2p

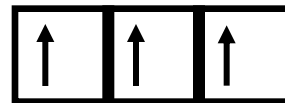
N **Z=7** $1s^2 2s^2 2p^3$



1s

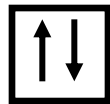


2s

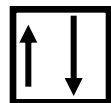


2p

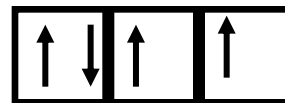
O **Z=8** $1s^2 2s^2 2p^4$



1s

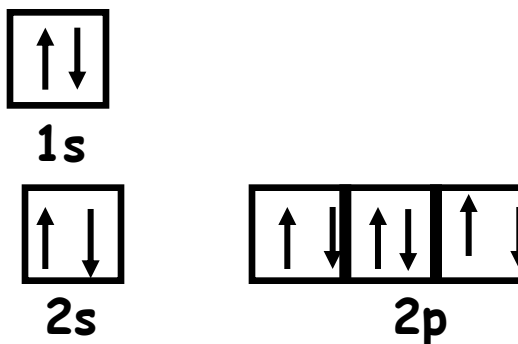
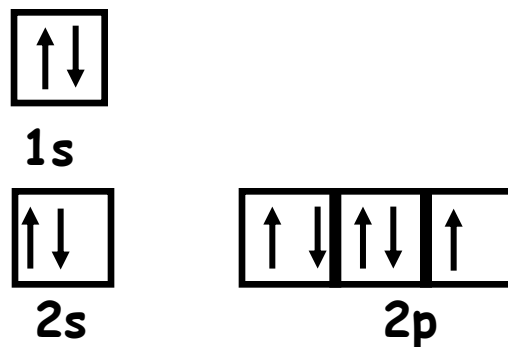


2s



2p

Per gli atomi successivi del secondo periodo si ha quindi:



In realtà questo è un particolare ordine di riempimento e quando due sottostrati sono vicini l'ordine delle loro energie può essere invertito.

Configurazioni elettroniche e tavola periodica

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

Per semplicità nella configurazione di un atomo si scrive [He] per indicare lo strato $n=1$ mentre si sta riempiendo lo strato $n=2$ oppure [Ne] per indicare gli strati $n=1$ e $n=2$ mentre si sta riempiendo lo strato $n=3$.

Ad esempio:

O $1s^2 2s^2 2p^4$ oppure [He] $2s^2 2p^4$

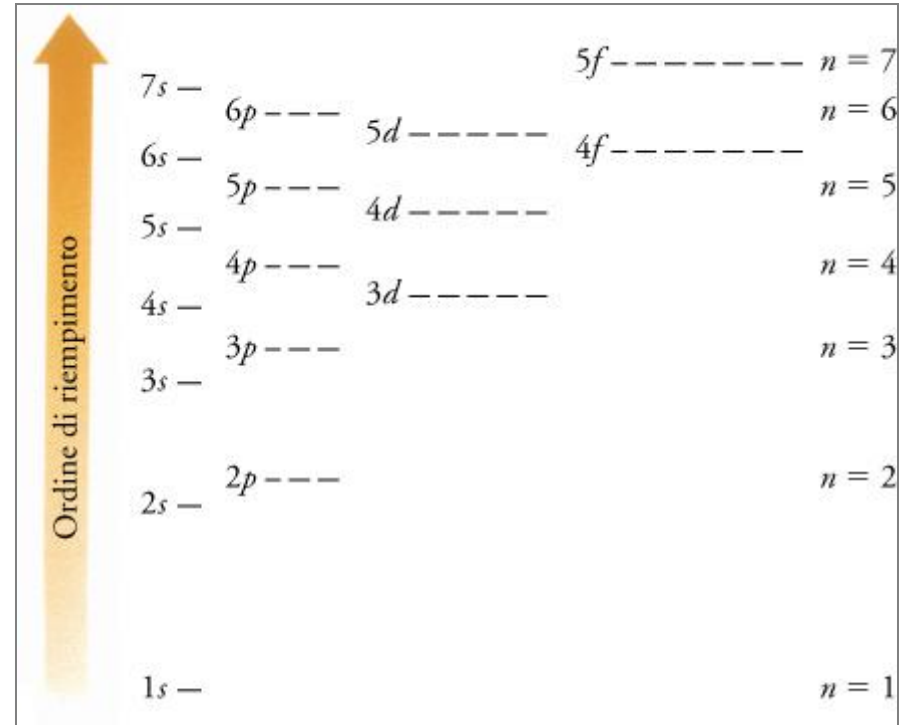
Configurazione elettronica esterna

Gli elettroni che occupano il livello energetico, o strato, più esterno definiscono la configurazione elettronica esterna di ciascun elemento

Es. Li [He] 2s¹

n=3

Na	Z=11	[Ne] 3s ¹	oppure	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹
Mg	Z=12	[Ne] 3s ²		
Al	Z=13	[Ne] 3s ² 3p ¹		
⋮				
Ar	Z=18	[Ne] 3s ² 3p ⁶		



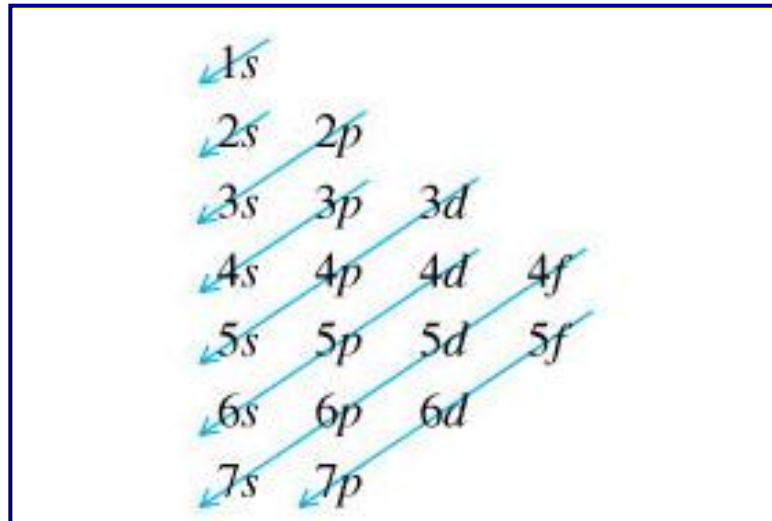
Anche se non si è completato lo strato n=3 il sottostrato rimanente, il 3d, è molto più in alto in energia del 3p, persino più del 4s. Pertanto la configurazione con il sottostrato 3p riempito è particolarmente stabile: l'argo è un elemento non reattivo.

Successivamente inizia il riempimento dell'orbitale 4s con

K Z=19 [Ar] 4s¹ ovvero 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s¹

Ca Z=20 [Ar]4s²

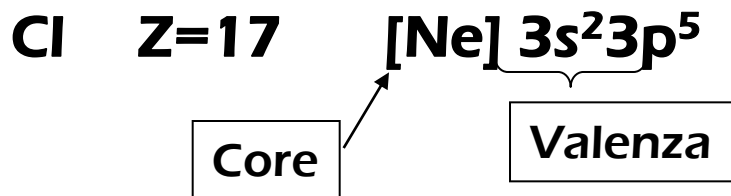
A questo punto inizia a riempirsi il sottostrato 3d con i metalli di transizione, 10 elementi perchè sono gli elettroni che possono occupare i cinque orbitali del sottostrato 3d.



➤ Gli elettroni appartenenti ai gusci più interni (elettroni di core). Si trovano nei gusci più interni e sono in media più vicini al nucleo: hanno energie più basse

➤ Gli elettroni di valenza sono quelli che occupano lo strato più esterno, quello che viene dopo la configurazione del gas nobile che lo precede.

Quindi elementi successivi ai gas nobili in un gruppo qualsiasi della tavola periodica sono costituiti da un core o nocciolo a gas nobile più una configurazione analoga per i restanti elettroni di valenza.



Le proprietà e il comportamento chimico di un atomo dipendono proprio dalla configurazione elettronica di valenza.

Tavola periodica

Periodo = riga

gli elementi appartenenti ad uno stesso periodo hanno **numero atomico** (e quindi numero di elettroni) **crescente da sinistra verso destra**, fino a riempimento di uno strato caratterizzato da un certo numero quantico principale n

Gruppo = colonna:

gli elementi appartenenti allo stesso gruppo hanno la **stessa configurazione elettronica esterna**, ma n crescente dall'alto verso il basso