

Periodicità

Cap. 8

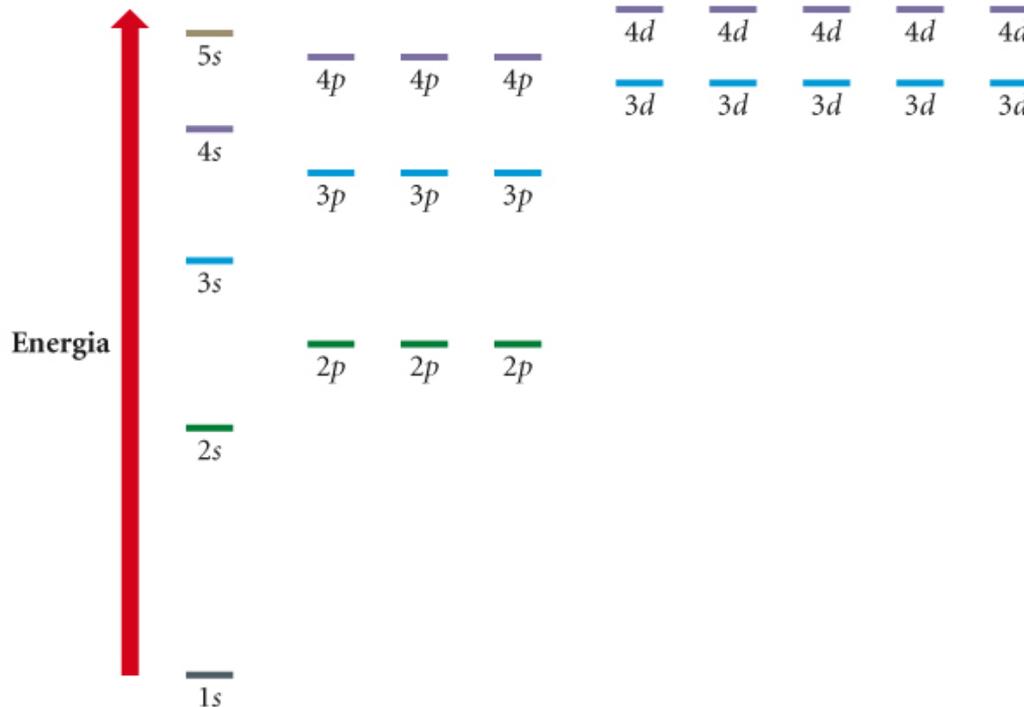
TRO

EdiSES

Atomi polielettronici

- La risoluzione ESATTA dell'equazione di Schrödinger non è possibile per atomi polielettronici. Si usano metodi di calcolo approssimati che danno funzioni d'onda analoghe a quelle dell'atomo di idrogeno.
- La differenza principale è che **per uno stesso numero quantico n l'energia degli orbitali varia leggermente perché dipende anche dal numero quantico secondario l .**

Ordine generale dell'energia degli orbitali per gli atomi multielettronici



▲ FIGURA 8.5 Ordine generale dell'energia degli orbitali di atomi multielettronici

Elettrone è un piccolo magnete. Quando è posto in un campo magnetico si orienta parallelamente o antiparallelamente al campo stesso.

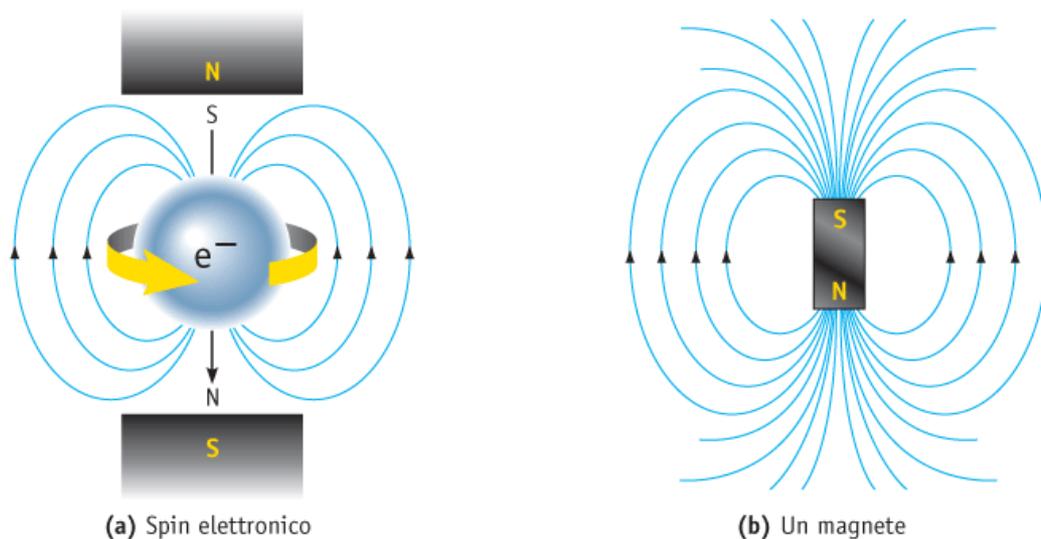


FIGURA 6.17 Campi magnetici: un magnete ed un elettrone. L'elettrone, con la sua rotazione (spin) e la carica elettrica negativa, si comporta come un "micromagnete". Solo due direzioni dello spin elettronico sono permesse rispetto ad un campo magnetico, rotazione in senso orario oppure in senso antiorario. Il polo nord dell'elettrone in rotazione può perciò essere o allineato al campo magnetico esterno, oppure opposto rispetto ad esso.

Per descrivere completamente il comportamento di un elettrone in un atomo è necessaria una quaterna di numeri quantici:

$$n, l, m_l, m_s$$

Configurazioni elettroniche degli elementi nel loro stato fondamentale

Abbiamo gli orbitali e il loro ordine di energia.

Come si riempiono di elettroni? Secondo le seguenti regole:

- Gli elettroni sono inseriti uno a uno partendo dall'orbitale a più bassa energia (1s) e poi salendo
- **Principio di esclusione di Pauli:** ogni orbitale contiene al massimo due elettroni, i quali sono caratterizzati da n , l , m_l uguali, ma da diverso numero quantico di spin m_s , i cui valori sono $\pm \frac{1}{2}$.
- Lo spin si indica con freccia in alto o in basso.

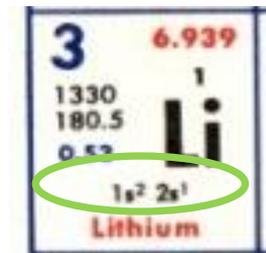
Z	simbolo	Configurazione elettronica	orbitali
1	H	$1s^1$	
2	He	$1s^2$	

Per l'He, il guscio con $n=1$ è completo. L'elio è un gas nobile.

Principio dell'Aufbau (“costruzione”)

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	2s	2p		
3	Li	$1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s^1$	↑	—	—	—

- L'orbitale 1s è già completo ($1s^2$, contiene 2 elettroni), quindi il terzo elettrone del Li occuperà l'orbitale successivo, ossia il 2s
- Dato che la configurazione elettronica $1s^2$ coincide con quella relativa all'atomo di He, generalmente non si indica esplicitamente come $1s^2$ ma come [He], a cui viene fatta seguire l'occupazione dell'orbitale seguente



Z	simbolo	Configurazione Elettronica	2s	2p		
3	Li	$1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s^1$	\uparrow	—	—	—
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	—	—	—

- il quarto elettrone del Be occuperà sempre l'orbitale 2s, ma con spin antiparallelo rispetto a quello del terzo elettrone (**principio di Pauli**)
- L'orbitale 2s è ora completo ($2s^2$)

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	2s	2p		
3	Li	$1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s^1$	\uparrow	—	—	—
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	—	—	—
5	B	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	—	—

- Dato che l'orbitale 2s è già completo ($2s^2$), il quinto elettrone del B occuperà uno degli orbitali 2p

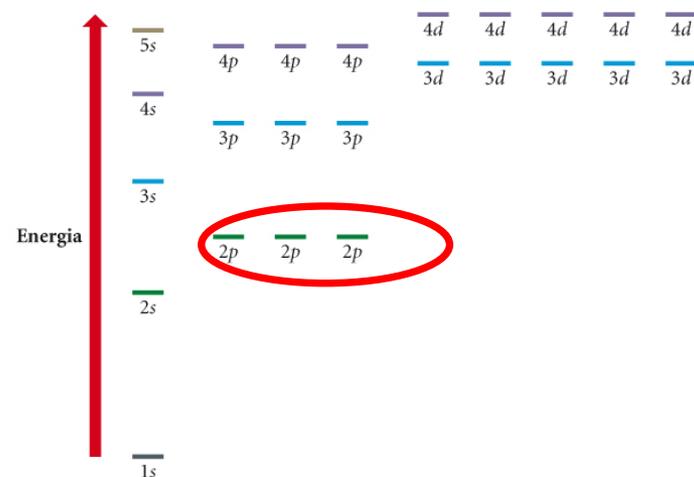
- Dove metto il sesto elettrone del Carbonio?

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	2s	2p		
3	Li	$1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s^1$	\uparrow	—	—	—
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	—	—	—
5	B	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	—	—
6	C					

Regola di Hund:

Gli orbitali degeneri vengono prima singolarmente occupati da elettroni con spin parallelo e solo successivamente da altri elettroni che si accoppiano con i precedenti

Ordine generale dell'energia degli orbitali per gli atomi multielettronici



▲ FIGURA 8.5 Ordine generale dell'energia degli orbitali di atomi multielettronici

- Dove metto il sesto elettrone del Carbonio?

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	2s	2p		
3	Li	$1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s^1$	\uparrow	—	—	—
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	—	—	—
5	B	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	—	—
6	C	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	—

- **Regola di Hund:** gli orbitali degeneri vengono prima singolarmente occupati da elettroni con spin parallelo e solo successivamente da altri elettroni che si accoppiano con i precedenti.

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	2s	2p		
3	Li	$1s^2 2s^1 = [\text{He}] 2s^1$	\uparrow	—	—	—
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	—	—	—
5	B	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	—	—
6	C	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	—
7	N	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow
8	O	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow
9	F	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow
10	Ne	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$

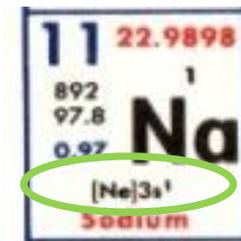
Per questi elementi il guscio con $n=1$ è interno, quello con $n=2$ è esterno.

Per il Ne, il guscio con $n=2$ è completo. Il neon è un gas nobile.

Elementi con Z da 11 a 18

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	3s	3p		
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 =$ $[Ne] 3s^1$	↑	—	—	—

- Anche in questo caso la configurazione elettronica $1s^2 2s^2 2p^6$ che coincide con quella relativa all'atomo di Ne, generalmente non si indica esplicitamente, ma si "abbrevia" come [Ne], a cui viene fatta seguire l'occupazione dell'orbitale seguente



Elementi con Z da 11 a 18

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	3s	3p		
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 =$ [Ne] $3s^1$				
12	Mg	[Ne] $3s^2$				

- Il 12° elettrone del Mg occuperà sempre l'orbitale 3s, ma con spin antiparallelo rispetto a quello dell'11° elettrone (**principio di Pauli**)
- L'orbitale 3s è ora completo ($3s^2$)

Elementi con Z da 11 a 18

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	3s	3p		
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 =$ [Ne] $3s^1$				
12	Mg	[Ne] $3s^2$				
13	Al	[Ne] $3s^2 3p^1$				
14	Si	[Ne] $3s^2 3p^2$				
15	P	[Ne] $3s^2 3p^3$				
16	S	[Ne] $3s^2 3p^4$				
17	Cl	[Ne] $3s^2 3p^5$				
18	Ar	[Ne] $3s^2 3p^6$				

Per questi elementi i gusci con $n=1$ e 2 sono interni, quello con $n=3$ è esterno. Per l'Ar, il guscio con $n=3$ è completo. L'argon è un gas nobile.

Elementi con Z da 19 a 36

- K (Z=19) e Ca (Z=20) riempiono l'orbitale **4s**, rispettivamente con uno e due elettroni
- Poi i **3d hanno energia più bassa dei 4p** e vengono riempiti dai 10 elementi che vanno da Z=21 a Z=30 (da Sc a Zn). Questi elementi costituiscono la prima serie di transizione.

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	4s	3d				
21	Sc	[Ar] 4s ² 3d ¹						

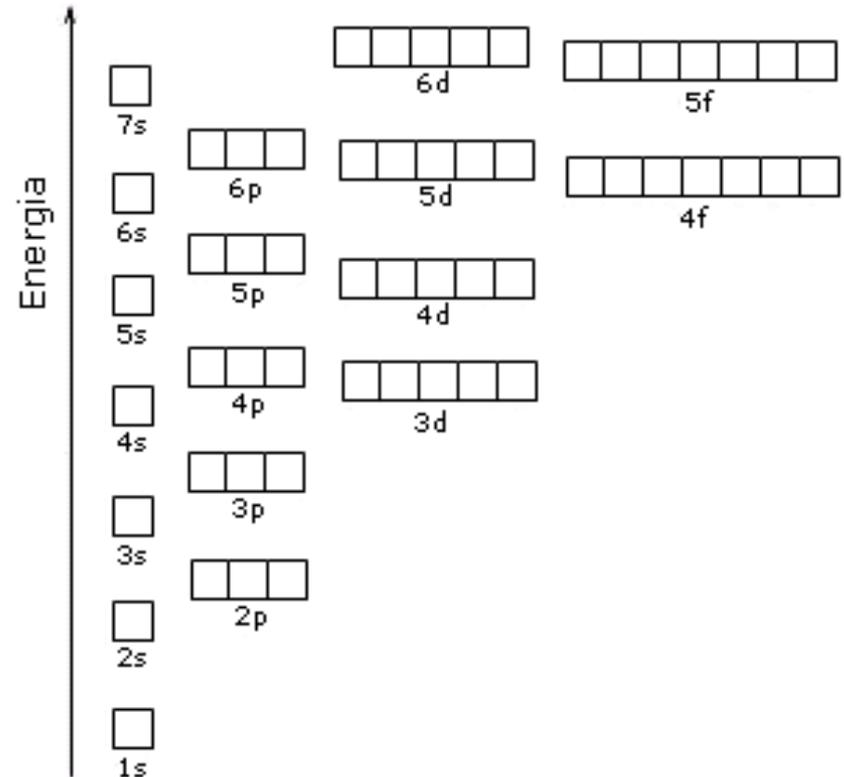
- Caso particolare di Cr e Cu:

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	4s	3d				
24	Cr	[Ar] 4s ¹ 3d ⁵						
29	Cu	[Ar] 4s ¹ 3d ¹⁰						

- Quando i 3d sono pieni, si passa a riempire gli orbitali **4p** (da Ga a Kr)

Elementi con $Z > 36$

- L'ordine di riempimento è 5s, 4d (seconda serie di transizione), 5p. Segue il 6s.
- Poiché orbitali 5d e 4f hanno energie molto simili, il primo elettrone va in 5d mentre i successivi 14 elettroni vanno in 4f (serie dei lantanidi). Poi si finisce riempimento dei 5d (terza serie di transizione).
- Il riempimento dei 5f dà luogo alla serie degli attinidi.
- Gli elementi con $Z > 92$ sono stati ottenuti artificialmente (transuranici).



La tavola periodica può essere suddivisa in **blocchi** che corrispondono al riempimento dei quattro sottolivelli quantici (s, p, d, f)

Blocchi orbitalici della tavola periodica

Gruppi																	18	
1 1A												13	14	15	16	17	18	
												3A	4A	5A	6A	7A	8A	
1	1 H $1s^1$																2 He $1s^2$	
2	3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$											5 B $2s^2 2p^1$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$	8 O $2s^2 2p^4$	9 F $2s^2 2p^5$	10 Ne $2s^2 2p^6$
3	11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B		10	11 1B	12 2B	13 Al $3s^2 3p^1$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$	16 S $3s^2 3p^4$	17 Cl $3s^2 3p^5$	18 Ar $3s^2 3p^6$
4	19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $4s^2 3d^1$	22 Ti $4s^2 3d^2$	23 V $4s^2 3d^3$	24 Cr $4s^1 3d^5$	25 Mn $4s^2 3d^5$	26 Fe $4s^2 3d^6$	27 Co $4s^2 3d^7$	28 Ni $4s^2 3d^8$	29 Cu $4s^1 3d^{10}$	30 Zn $4s^2 3d^{10}$	31 Ga $4s^2 4p^1$	32 Ge $4s^2 4p^2$	33 As $4s^2 4p^3$	34 Se $4s^2 4p^4$	35 Br $4s^2 4p^5$	36 Kr $4s^2 4p^6$
5	37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $5s^2 4d^1$	40 Zr $5s^2 4d^2$	41 Nb $5s^1 4d^4$	42 Mo $5s^1 4d^5$	43 Tc $5s^2 4d^5$	44 Ru $5s^1 4d^7$	45 Rh $5s^1 4d^8$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $5s^1 4d^{10}$	48 Cd $5s^2 4d^{10}$	49 In $5s^2 5p^1$	50 Sn $5s^2 5p^2$	51 Sb $5s^2 5p^3$	52 Te $5s^2 5p^4$	53 I $5s^2 5p^5$	54 Xe $5s^2 5p^6$
6	55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 La $6s^2 5d^1$	72 Hf $6s^2 5d^2$	73 Ta $6s^2 5d^3$	74 W $6s^2 5d^4$	75 Re $6s^2 5d^5$	76 Os $6s^2 5d^6$	77 Ir $6s^2 5d^7$	78 Pt $6s^1 5d^9$	79 Au $6s^1 5d^{10}$	80 Hg $6s^2 5d^{10}$	81 Tl $6s^2 6p^1$	82 Pb $6s^2 6p^2$	83 Bi $6s^2 6p^3$	84 Po $6s^2 6p^4$	85 At $6s^2 6p^5$	86 Rn $6s^2 6p^6$
7	87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 Ac $7s^2 6d^1$	104 Rf $7s^2 6d^2$	105 Db $7s^2 6d^3$	106 Sg $7s^2 6d^4$	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 **	114 Fl	115 **	116 Lv	117 **	118 **

Lantanidi	58 Ce $6s^2 4f^1 5d^1$	59 Pr $6s^2 4f^3$	60 Nd $6s^2 4f^4$	61 Pm $6s^2 4f^5$	62 Sm $6s^2 4f^6$	63 Eu $6s^2 4f^7$	64 Gd $6s^2 4f^7 5d^1$	65 Tb $6s^2 4f^9$	66 Dy $6s^2 4f^{10}$	67 Ho $6s^2 4f^{11}$	68 Er $6s^2 4f^{12}$	69 Tm $6s^2 4f^{13}$	70 Yb $6s^2 4f^{14}$	71 Lu $6s^2 4f^{14} 5d^1$
Attinidi	90 Th $7s^2 6d^2$	91 Pa $7s^2 5f^2 6d^1$	92 U $7s^2 5f^3 6d^1$	93 Np $7s^2 5f^4 6d^1$	94 Pu $7s^2 5f^6$	95 Am $7s^2 5f^7$	96 Cm $7s^2 5f^7 6d^1$	97 Bk $7s^2 5f^9$	98 Cf $7s^2 5f^{10}$	99 Es $7s^2 5f^{11}$	100 Fm $7s^2 5f^{12}$	101 Md $7s^2 5f^{13}$	102 No $7s^2 5f^{14}$	103 Lr $7s^2 5f^{14} 6d^1$

▲ FIGURA 8.7 I blocchi s, p, d ed f della tavola periodica

Z crescente, si va **a capo** ogni volta che **la configurazione elettronica esterna è ns^1**

La reattività chimica dipende dalla configurazione elettronica esterna o di valenza

blocco s		blocco p																							
	1A (1)	2A (2)	3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)																	
n	ns^1	ns^2	ns^2np^1	ns^2np^2	ns^2np^3	ns^2np^4	ns^2np^5	ns^2np^6																	
1	1 H $1s^1$	2 He $1s^2$						He																	
2	3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$																							
3	11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$																							
4	19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31 Ga $4s^24p^1$	32 Ge $4s^24p^2$	33 As $4s^24p^3$	34 Se $4s^24p^4$	35 Br $4s^24p^5$	36 Kr $4s^24p^6$							
5	37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49 In $5s^25p^1$	50 Sn $5s^25p^2$	51 Sb $5s^25p^3$	52 Te $5s^25p^4$	53 I $5s^25p^5$	54 Xe $5s^25p^6$							
6	55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81 Tl $6s^26p^1$	82 Pb $6s^26p^2$	83 Bi $6s^26p^3$	84 Po $6s^26p^4$	85 At $6s^26p^5$	86 Rn $6s^26p^6$							
7	87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113 s^27p^1	114 $7s^27p^2$	115 $7s^27p^3$	116 $7s^27p^4$									
elementi di transizione (blocco d)																									
elementi di transizione interna (blocco f)																									
												58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
												90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103

Le proprietà chimiche dipendono dalla configurazione elettronica.
La reattività e il legame fra atomi coinvolge gli elettroni del guscio più esterno, detti anche **elettroni di valenza.**

Osservando la tavola periodica, **muovendosi in verticale lungo un gruppo, la configurazione elettronica esterna è la stessa**



Elementi di uno stesso gruppo hanno proprietà e reattività simili!

- ns^1 metalli alcalini (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)
- ns^2 metalli alcalino terrosi (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra)
- ns^2np^5 alogeni (F, Cl, Br, I, At), con caratteristiche di non metalli
- ns^2np^6 gas nobili (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn). Nobili perché scarsamente reattivi

Configurazioni elettroniche di CATIONI: Esempi

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	3s	3p		
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 =$ [Ne] $3s^1$				
12	Mg	[Ne] $3s^2$				
13	Al	[Ne] $3s^2 3p^1$				
11	Na ⁺	[Ne]				
12	Mg ²⁺	[Ne]				
13	Al ³⁺	[Ne]				

Questi cationi, ottenuti quando i relativi atomi neutri perdono rispettivamente 1, 2 o 3 elettroni, raggiungono la configurazione elettronica del gas nobile che li precede, ossia Ne.

Configurazioni elettroniche di ANIONI: Esempi

Z	simbolo	Configurazione Elettronica	ns	np			
9	F	[He] 2s ² 2p ⁵					
17	Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵					
9	F ⁻	[He] 2s ² 2p ⁶ = [Ne]					
17	Cl ⁻	[Ne] 3s ² 3p ⁶ = [Ar]					

Questi anioni, ottenuti quando i relativi atomi neutri acquistano 1 elettrone, raggiungono la configurazione elettronica del gas nobile che li segue, ossia Ne nel caso dell'anione F⁻ e Ar nel caso di Cl⁻.

Gruppo 1AMetalli
alcaliniMolto
reattivi**Gruppo 2A**Metalli alcalino-
terrosi

Reattivi

Gruppo 7A

Alogeni

Molto
reattivi**Gruppo 8A**

Gas nobili

Inerti

Elementi che formano ioni con cariche che possono essere previste

	1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	8A
1	Li ⁺														N ³⁻	O ²⁻	F ⁻	
2	Na ⁺	Mg ²⁺	3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B	Al ³⁺			S ²⁻	Cl ⁻		
3	K ⁺	Ca ²⁺													Se ²⁻	Br ⁻		
4	Rb ⁺	Sr ²⁺													Te ²⁻	I ⁻		
5	Cs ⁺	Ba ²⁺																

▲ FIGURA 8.8 Elementi che formano ioni con cariche che possono essere previste

Si noti che ciascun ione ha la configurazione elettronica di un gas nobile.

PROPRIETA' PERIODICHE

Poiché il numero degli elettroni di valenza varia in modo regolare spostandosi lungo un periodo, molte proprietà variano in modo periodico.

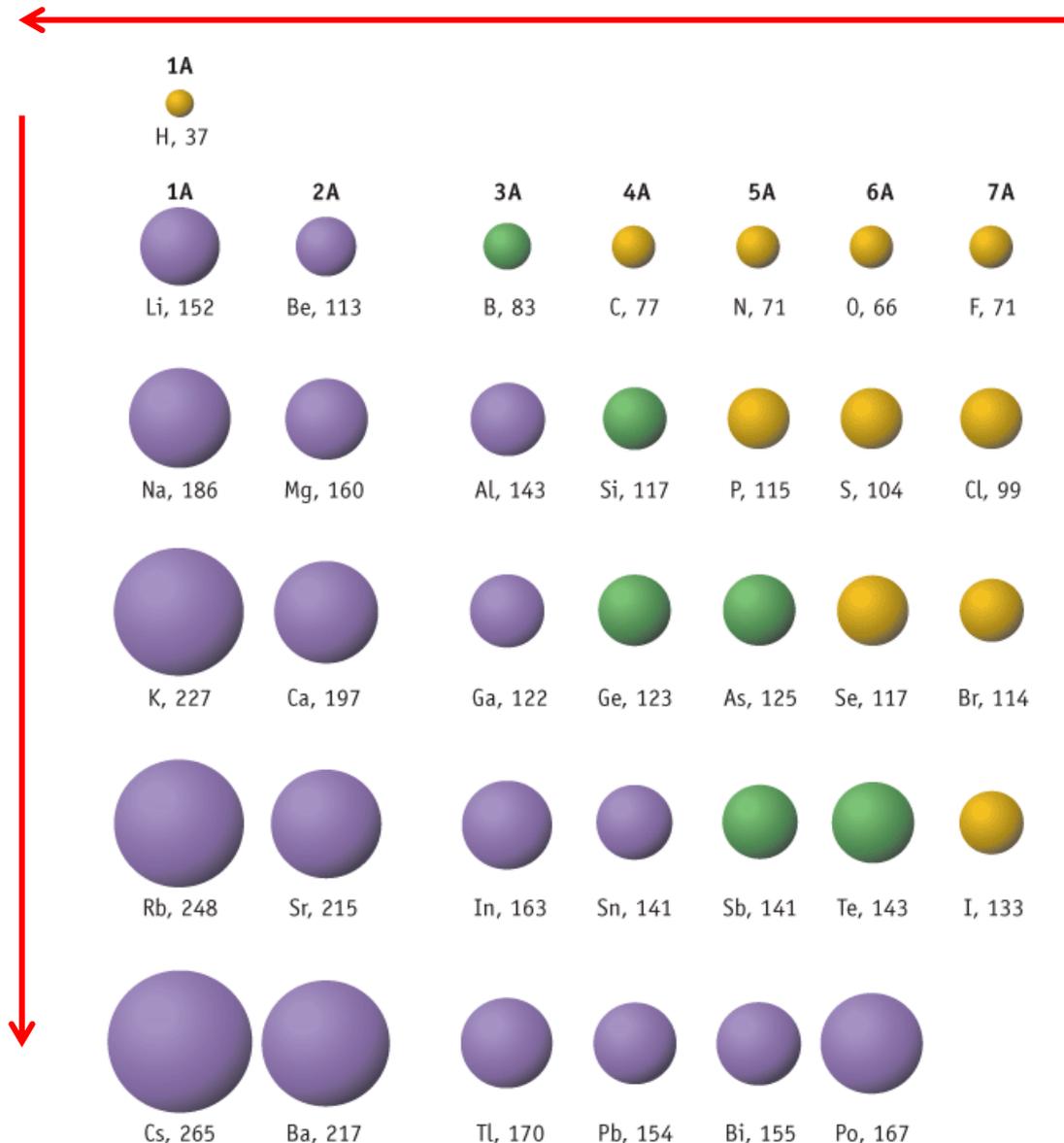
Esse sono:

- raggio atomico*** (la metà della distanza tra i nuclei di due atomi contigui)
- energia di prima ionizzazione***
- affinità elettronica***
- dimensione degli ioni***
- elettronegatività*** (proprietà di cui parleremo più avanti)

Raggio atomico (in pm)

LUNGO UN GRUPPO:

Il numero n aumenta. Poiché le dimensioni dell'orbitale aumentano con n , gli elettroni che occupano gli orbitali più esterni sono sempre più lontani dal nucleo



LUNGO UN PERIODO:

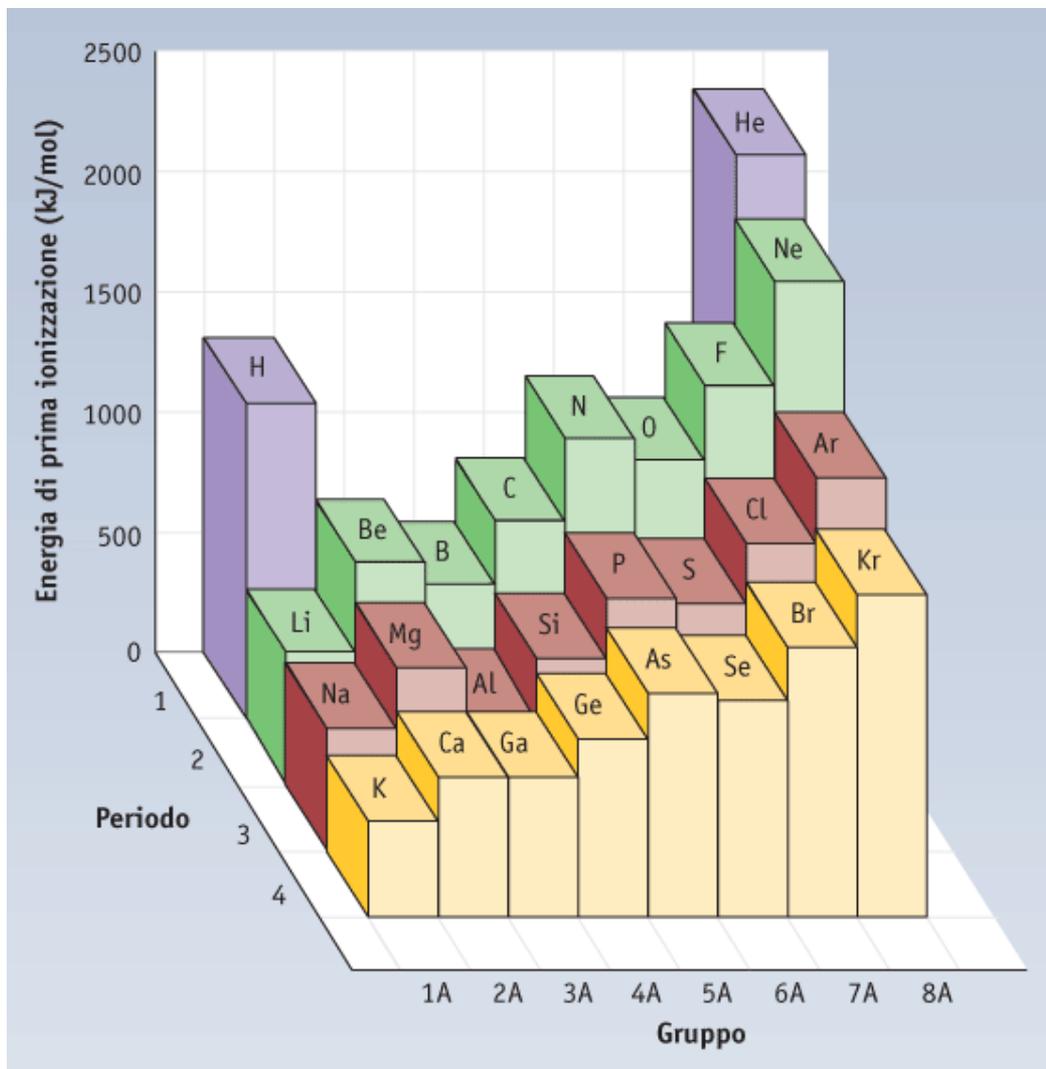
Gli elettroni occupano orbitali con stesso numero quantico n e ci si aspetta che la dimensione atomica rimanga costante nel periodo. Tuttavia il numero dei protoni nel nucleo aumenta e così aumenta l'attrazione che essi esercitano sugli elettroni che tendono a stare più vicini al nucleo.

Energia di prima ionizzazione

è la quantità di energia necessaria per rimuovere un elettrone dall'atomo M allo stato gassoso e trasformarlo nel catione M^+ .



Diminuisce lungo un gruppo.
All'aumentare di n gli elettroni sono più distanti dal nucleo e quindi meno attratti da esso.



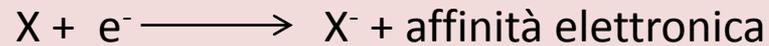
Aumenta lungo un periodo.

I gas nobili hanno guscio pieno ed è una situazione stabile.

I metalli alcalini invece perdono facilmente l'elettrone di valenza perché diventano come il gas nobile che li precede.

Affinità elettronica (AE)

è la variazione di energia associata all'acquisto di un elettrone da parte di un atomo isolato X, che si trasforma quindi nell'anione X⁻.



AE è (quasi sempre) negativa perché l'acquisto di un elettrone fa sì che l'atomo rilasci energia.

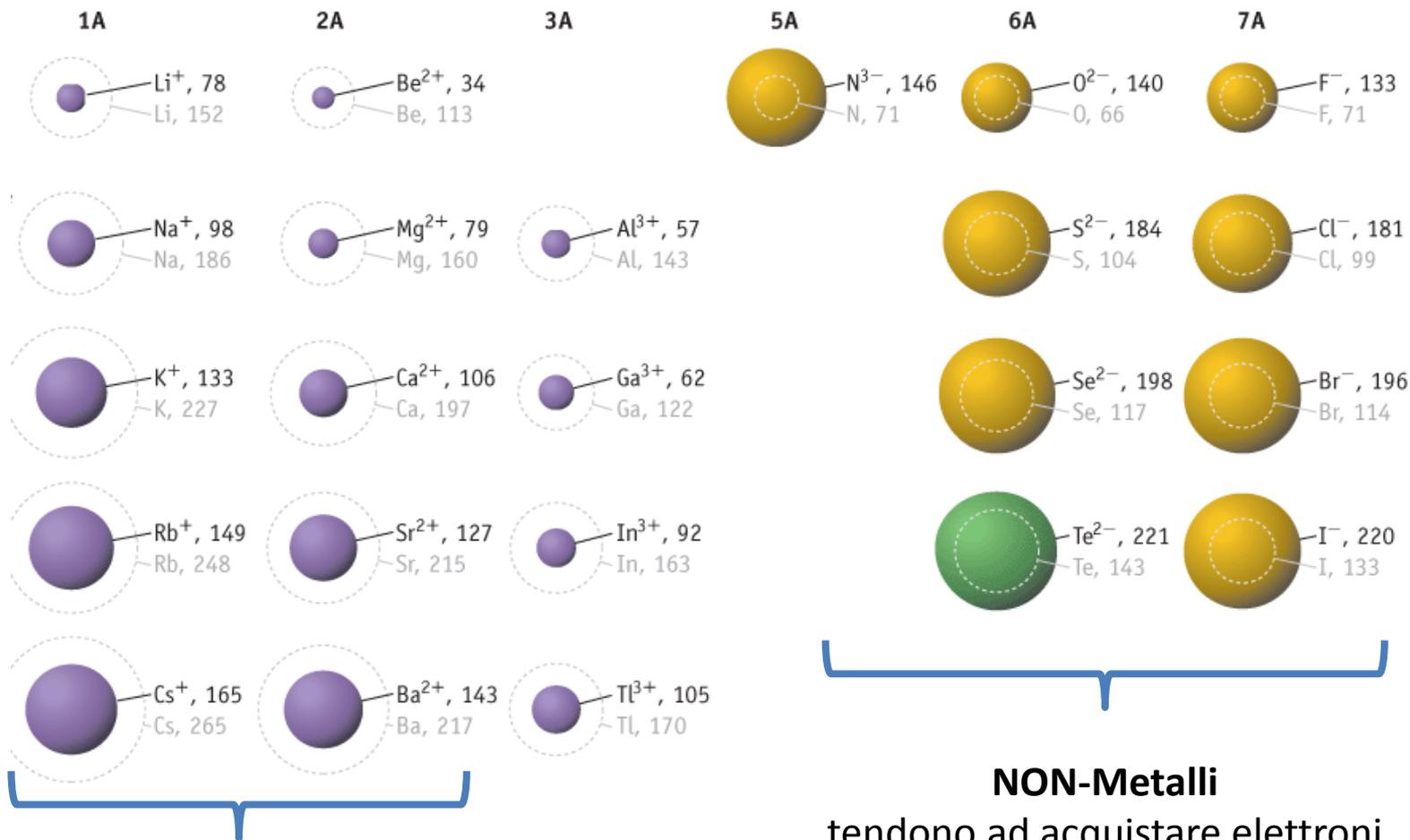
Affinità elettronica (kJ/mol)

1A		2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
H -73								He >0
Li -60	Be >0		B -27	C -122	N >0	O -141	F -328	Ne >0
Na -53	Mg >0		Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar >0
K -48	Ca -2		Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr >0
Rb -47	Sr -5		In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe >0

Gli elementi che hanno AE più grande e negativa formeranno anioni stabili

Dimensioni degli ioni

Aumento di dimensioni scendendo lungo un gruppo



Metalli

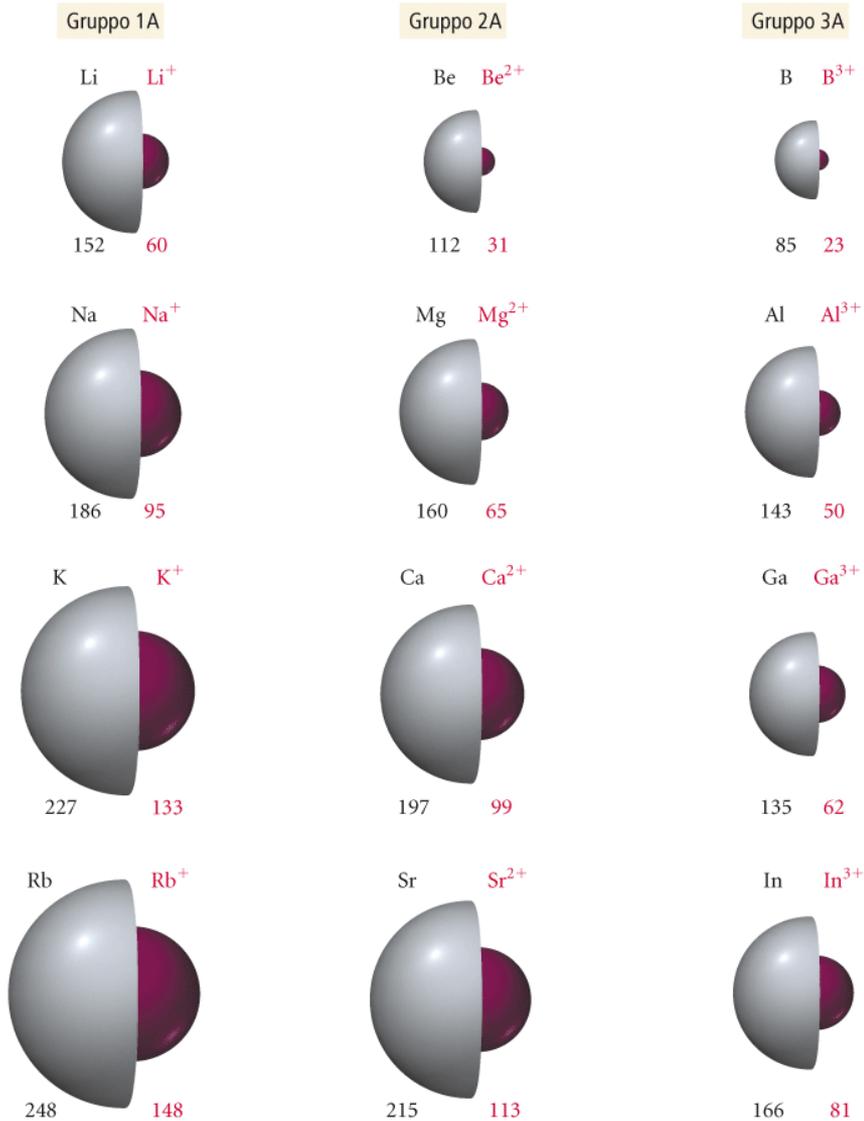
tendono a perdere elettroni

NON-Metalli

tendono ad acquistare elettroni

Un catione è più piccolo del rispettivo atomo neutro

Raggi degli atomi e dei loro cationi (pm)



Un anione è più grande del rispettivo atomo neutro

Raggi degli atomi e dei loro anioni (pm)

