



Scuola di Ingegneria Industriale e dell'Informazione
Insegnamento di **Chimica Generale**
083424 - CCS *CHI* e *MAT*

 POLITECNICO DI MILANO



Configurazioni Elettroniche – Tabella Periodica degli Elementi (cap. 6,7)

Prof. Attilio Citterio

Dipartimento CMIC “Giulio Natta”

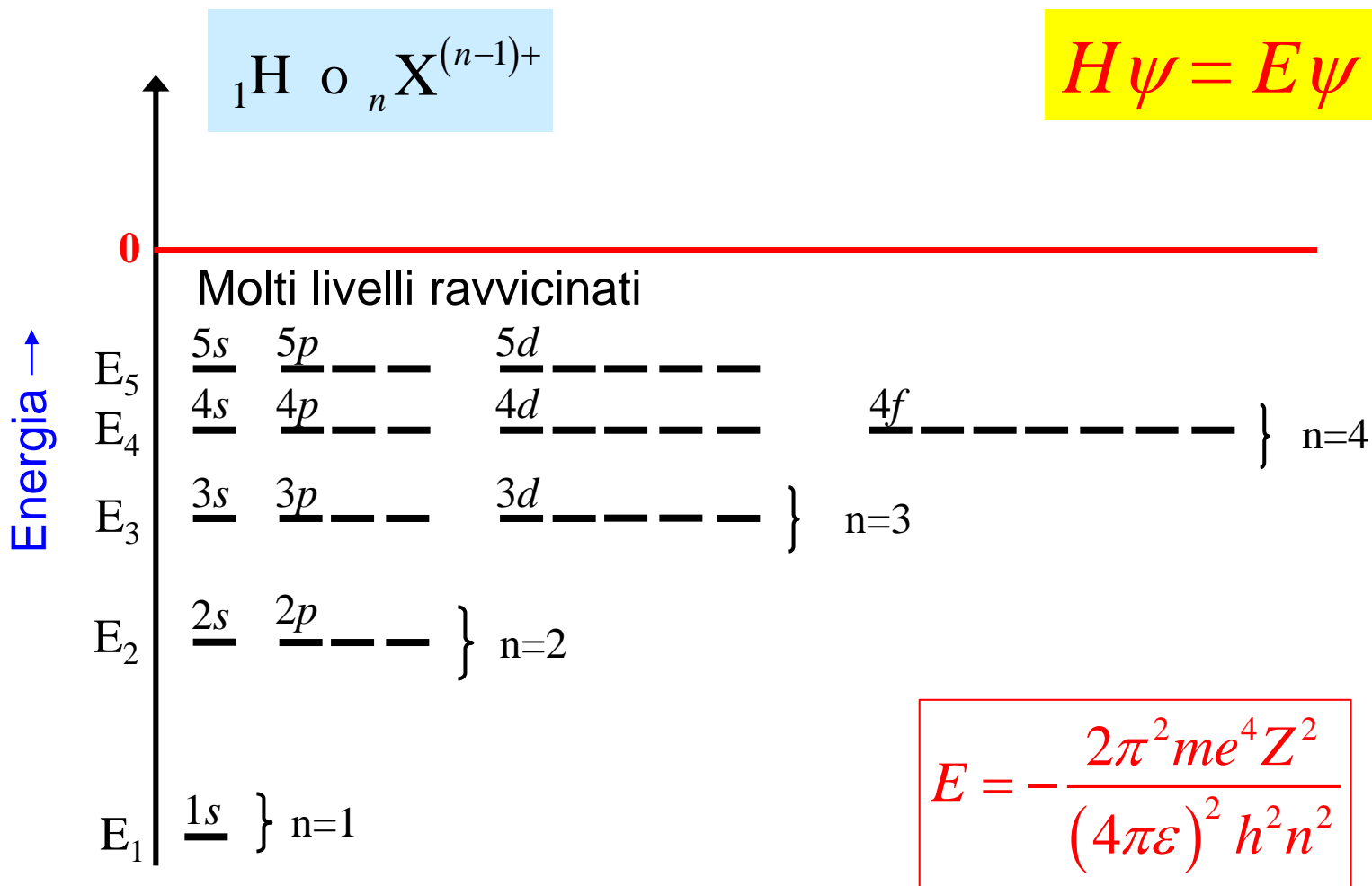
<http://iscamap.chem.polimi.it/citterio/it/education/general-chemistry-lessons/>

Riassunto della Lezione Precedente

- Le radiazioni (caratterizzate da λ e ν) si spostano a velocità c e hanno proprietà di “onda” e di “particella” (Compton), trasportando Energia proporzionale alla frequenza ($E = h\nu$)
- Le radiazioni interagiscono con la materia essendo assorbite a certe definite frequenze (nel Visibile e nell'UV) e l'assorbimento modifica lo stato energetico degli elettroni negli atomi, che, ritornando nello stato fondamentale, riemettono radiazioni della stessa frequenza).
- Gli elettroni in un atomo hanno energie definite, ma ciò non è compatibile con la fisica classica e con l'esistenza del principio di indeterminazione di Heisenberg ($\Delta p \cdot \Delta x > h/4\pi$). La descrizione come radiazione associata a tale particella ($\lambda = h/p$) consente una descrizione probabilistica di tale particella ($\psi =$ funzione d'onda).
- Per l'atomo idrogenoide l'equazione di Schrödinger ($H\psi = E\psi$) individua gli stati stazionari e spiega le energie fisse dell'elettrone.
- Ψ in coordinate polari (r, θ, φ) è suddivisibile in tre funzioni (contenenti tre numeri quantici n, l, m_l soggetti a restrizioni).



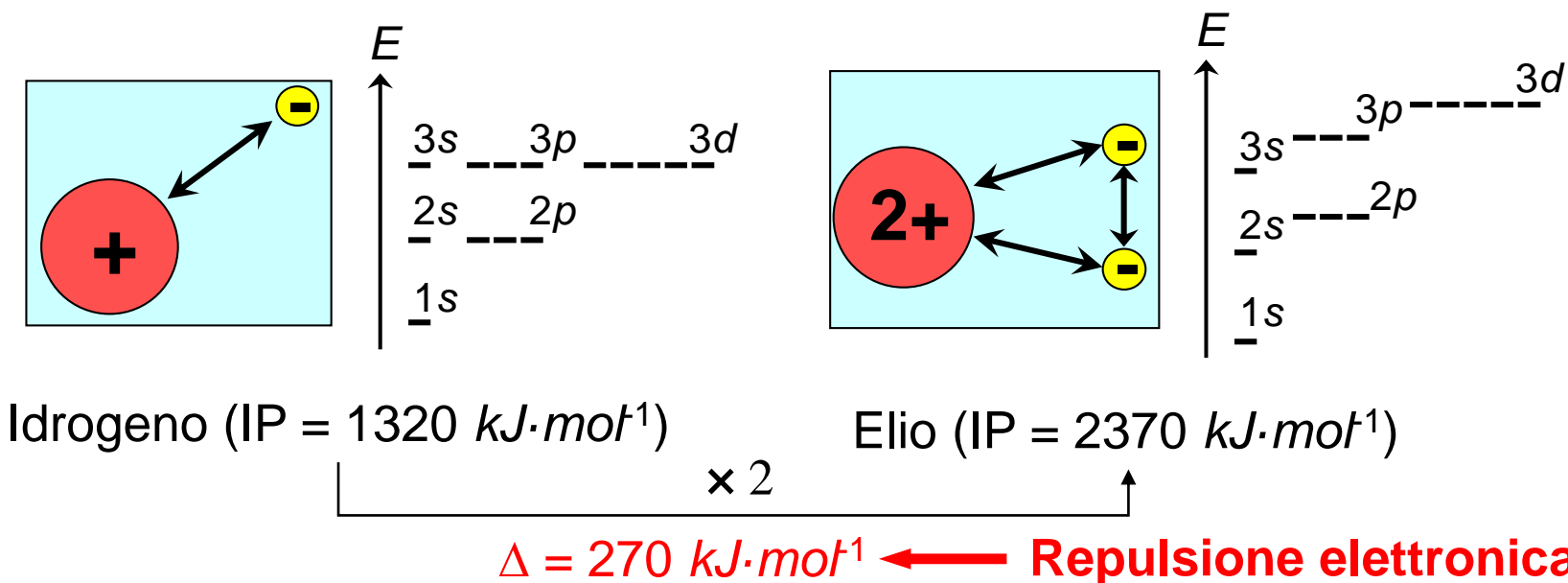
Riassunto: Schema dei Livelli Energetici per un Atomo Idrogenoide





Il Problema degli Atomi Pluri-elettronici e della Classificazione degli Elementi

- Con due elettroni in un atomo non esiste più una soluzione analitica dell'Eq. di Schrödinger, ma si possono ottenere soluzioni approssimate
- Però, gli elementi hanno logiche simili nel controllare le energie di interazione tra nuclei ed elettroni
- Le analogie nei livelli energetici consentono (o giustificano) una classificazione degli elementi?





Atomi Pluri-Elettronici

Sono descrivibili con la teoria quantistica solo in modo approssimato in quanto soluzioni matematiche esatte dell'Equazione di Schrödinger non sono possibili.

Approccio adottato: Iterazione come metodo di soluzioni approssimate,

Argomenti raccolti in questa presentazione:

- orbitali e numeri quantici di atomi pluri-elettronici,
- concetto di schermo e sua valutazione,
- regola di Hund, distribuzioni di probabilità, nodi
- spin elettronico,
- diamagnetismo, paramagnetismo
- configurazioni elettroniche.



Somiglianze –

- 4 numeri quantici richiesti per ogni elettrone.
- Stessa dipendenza angolare in quanto i potenziali efficaci mono-elettronici sono sfericamente simmetrici (nessuna dipendenza angolare).

Differenze –

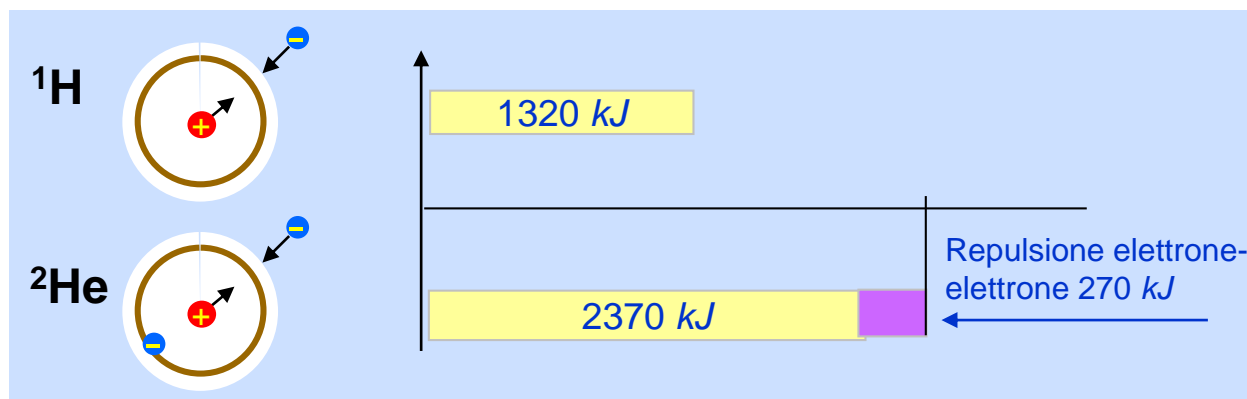
- Le degenerazioni sono parzialmente rimosse per gli orbitali di Hartree; le energie di Hartree dipendono sia da n che da l , mentre le energie degli orbitali dell'atomo H dipendono solo da n .
- La dipendenza radiale non è la stessa in quanto la carica che crea il potenziale efficace Coulombiano non è centrata sul nucleo.

Orbitali di Hartree – Schermo

Concetto:

L'idea fisica è semplice – Gli *elettroni di Valenza* tendono a localizzarsi con alta probabilità “all'esterno degli altri” (elettroni interni). Essi non sono perciò attratti dal nucleo dalla carica completa Z del nucleo in quanto c'è una significativa quantità (probabilità) di carica negativa localizzata tra l'elettrone “esterno” e il nucleo (**schermo**). In questa approssimazione, si sostituisce semplicemente l'attrazione Coulombiana tra $Ze / -e$ con $Z_{eff} / -e$.

Z_{eff} dipende dai numeri quantici, ma in modo prevedibile. Tutti gli elettroni in un “guscio” hanno lo stesso numero quantico n .





$$V_{eff}^n(r) = \frac{Z_{eff}(n)e^2}{r}$$

Qualitativamente, provare ad assegnare ***differenti*** valori di Z_{eff} per i differenti strati nel krypto – un gas inerte che si trova alla fine della quarta riga della tabella periodica – e quindi precisare quali valori Z_{eff} dovrebbero essere assunti.

Una migliore approssimazione spiega la dipendenza di Z_{eff} sia da n che da l .

Problema: fornire una spiegazione fisica del perché per $n = 3$, $Z_{eff}(3,0) > Z_{eff}(3,1) > Z_{eff}(3,2)$.



Costruzione della struttura di un atomo pluri-elettronico:

- Orbitali di Hartree (o qualche altra approssimazione) – 4 numeri quantici come per gli atomi mono-elettronici.
- La **degenerazione energetica degli orbitali è “rimossa”** – gli orbitali *s, p, d, f* non hanno più la stessa energia per un dato *n*.
- Non ci sono due elettroni in un atomo che posseggono gli stessi 4 numeri quantici (**principio di Esclusione di Pauli**).
- Gli elettroni entrano negli orbitali ad energia più bassa per dare la configurazione più stabile possibile – detta **stato fondamentale**.
- Inserire uno o più elettroni in orbitali diversi da quello più basso occupato porta ad uno stato **“eccitato”** dell’atomo.
- Per atomi pluri-elettronici di Hartree, gli orbitali si indicano nello stesso modo usato per H ma le energie e le dimensioni variano con l’atomo
- **Regola di Hund** = sempre il massimo spin se ci sono orbitali degeneri (cioè della stessa energia).



Peculiarità degli Atomi Pluri-elettronici

L'esistenza di più di un elettrone nell'atomo impone le seguenti modifiche alla teoria per l'atomo di idrogeno.

- 1) Si deve porre un limite al numero di elettroni che possono coesistere in un orbitale.
- 2) l'energia di un elettrone in atomi pluri-elettronici non dipende solo dal numero quantico principale n ma anche dal numero quantico l .
- 3) Si deve introdurre un quarto numero quantico, m_s : m_s è noto come **numero quantico di spin** – indica se un certo elettrone «ruota in senso orario o in senso antiorario» in un campo magnetico (o meglio se è allineato o opposto ad esso).



Approssimazione del campo auto-consistente (SCF) – molto usata e porta a risultati molto vicini a quelli misurati.

Concetto:

Assume che il secondo elettrone si muova nel potenziale coulombiano **sfericamente mediato** del primo elettrone e vice versa. La mediazione rimuove la dipendenza angolare e sostituisce il termine di repulsione e^- / e^- nell'equazione di Schrödinger con un termine che dipende solo dalla distanza r del secondo elettrone dal nucleo. In questo caso il **potenziale Coulombiano “efficace”** è scomposto in due parti – un contributo nucleare (attrattivo) e un contributo inferiore repulsivo dovuto al secondo elettrone che sente il potenziale medio del primo elettrone. Ora che si conosce le funzioni d'onda o il potenziale efficace si può verificarne la bontà rispetto al dato sperimentale e iterare fino ad “auto-consistenza” per ottenere la migliore soluzione approssimata nell'assunto fatto. Con analogha procedura iterativa, si possono trattare gli atomi con n -elettroni – si introdurranno n “medie” per iterazione piuttosto che solo 2.

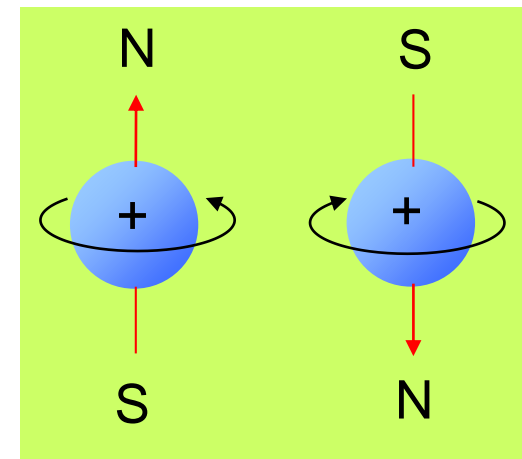


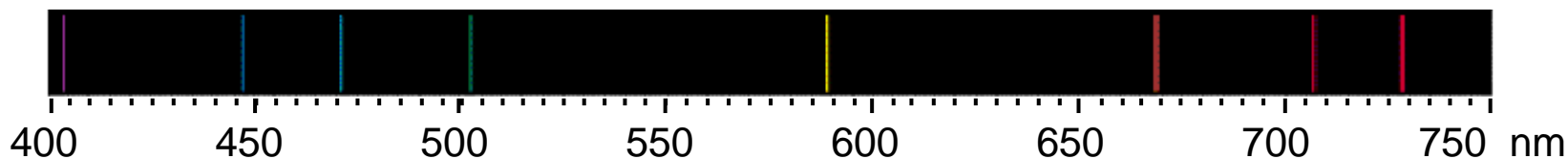
Spin Elettronico

- **Gli spettri a righe di atomi pluri-elettronici mostrano che ogni linea è costituita da coppie di righe molto ravvicinate.**
- **Stern e Gerlach progettarono un esperimento per chiarirne il perché.**



Doppia riga nello spettro di emissione del sodio (Na)



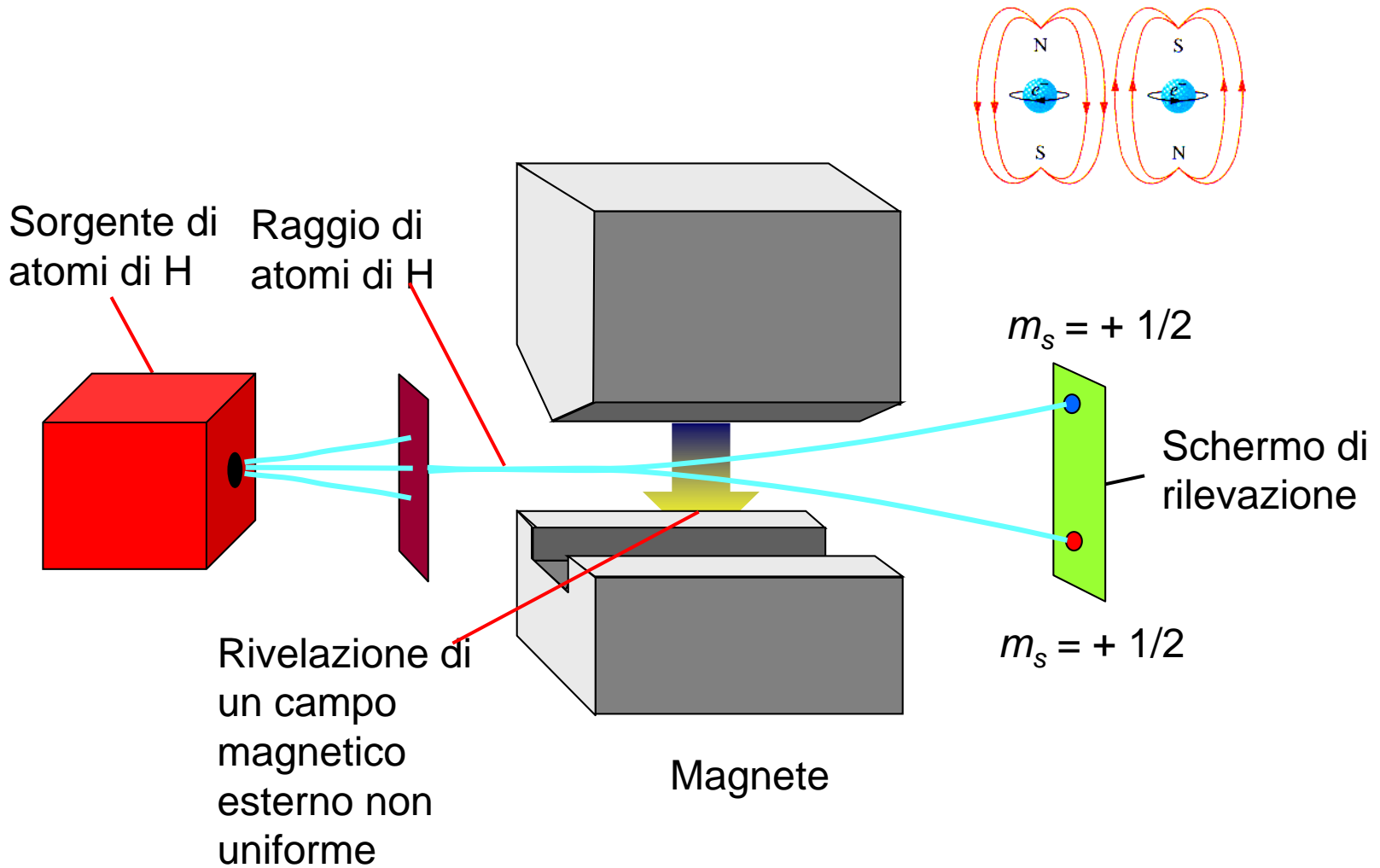


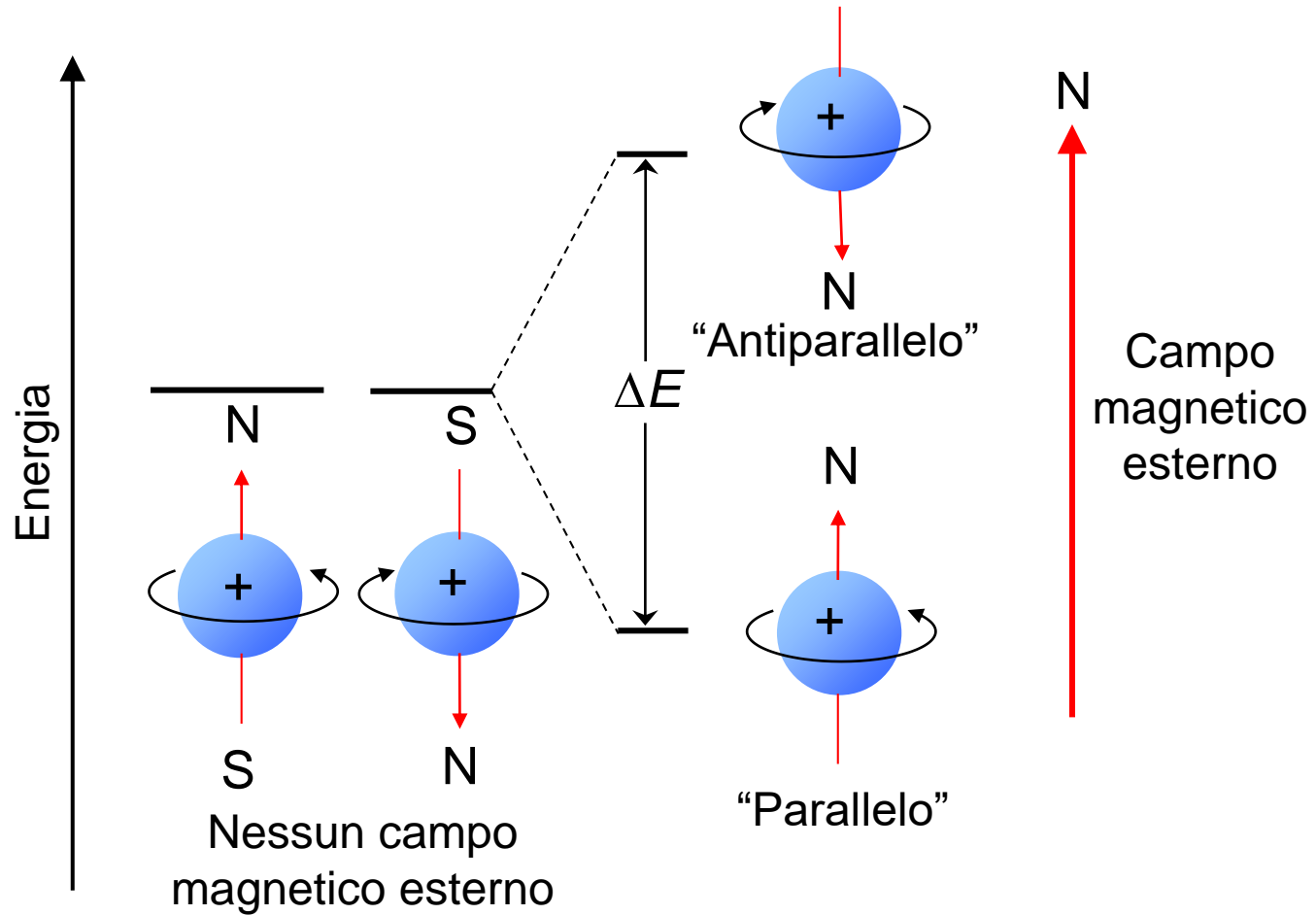
Spettro He



Spettro H

L'elio, con 2 elettroni, mostra righe aggiuntive nello spettro di emissione a seguito della separazione dei livelli energetici degli orbitali con diversi valori di l .







Numero Quantico di Spin (m_s)

Numero Quantico di Spin: m_s fornisce lo spin
(in senso orario o antiorario)

- I valori dello spin sono:

$$m_s = + 1/2 \quad \text{oppure} \quad m_s = - 1/2$$

- $n = 1$ $l = 0$ $m_l = 0$ $m_s = + 1/2$ e $- 1/2$
- $n = 2$ $l = 0$ $m_l = 0$ $m_s = + 1/2$ e $- 1/2$
- $l = 1$ $m_l = -1$ $m_s = + 1/2$ e $- 1/2$
- $m_l = 0$ $m_s = + 1/2$ e $- 1/2$
- $m_l = +1$ $m_s = + 1/2$ e $- 1/2$

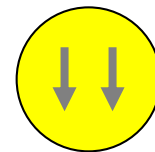
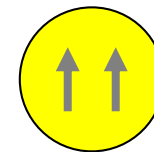
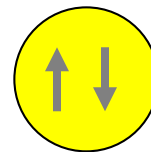
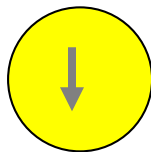
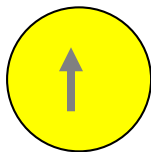
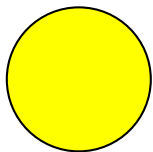


Numero Quantico	Informazione	Possibili Valori
Principale (n)	Qual è la distanza media dal nucleo? (strato)	1, 2, 3, 4,...infinito
Momento Angolare (l)	Qual è la forma dell'orbitale? (sottostrato)	0, 1, 2, 3,...($n-1$)
Magnetico (m_l)	Qual è l' orientazione dell'orbitale?	- l ,..., 0,..., + l
Spin (m_s)	Qual è lo spin dell'elettrone nell'orbitale?	+ $\frac{1}{2}$ or - $\frac{1}{2}$

n , l , m_l specificano l'orbitale dell'elettrone, m_s specifica la proprietà di spin dell'elettrone.

Principio di Esclusione di Pauli

- Ogni elettrone in un atomo deve avere un **insieme unico di 4 numeri quantici** : n, l, m_l, m_s
- **Solo due elettroni** possono essere **descritti** dallo **stesso orbitale** e questi due elettroni **devono** avere **spin opposti**.
- Gli elettroni nello **stato fondamentale** occupano gli orbitali ad energia inferiore.
- Un **orbitale** si dice “**pieno**” se contiene 2 elettroni.



Orbitale
vuoto

Un elettrone
(permesso)

Un elettrone
(permesso)

2 elettroni
con spin
opposti
(permesso)

2 elettroni
con lo
stesso spin
(non permesso)

2 elettroni
con lo
stesso spin
(non permesso)



Come Risultato del Principio di Esclusione di Pauli, gli elettroni con lo stesso spin si evitano nello spazio. Ciò riduce l'energia di repulsione Coulombiana dovuta all'interazione delle cariche con lo stesso segno.

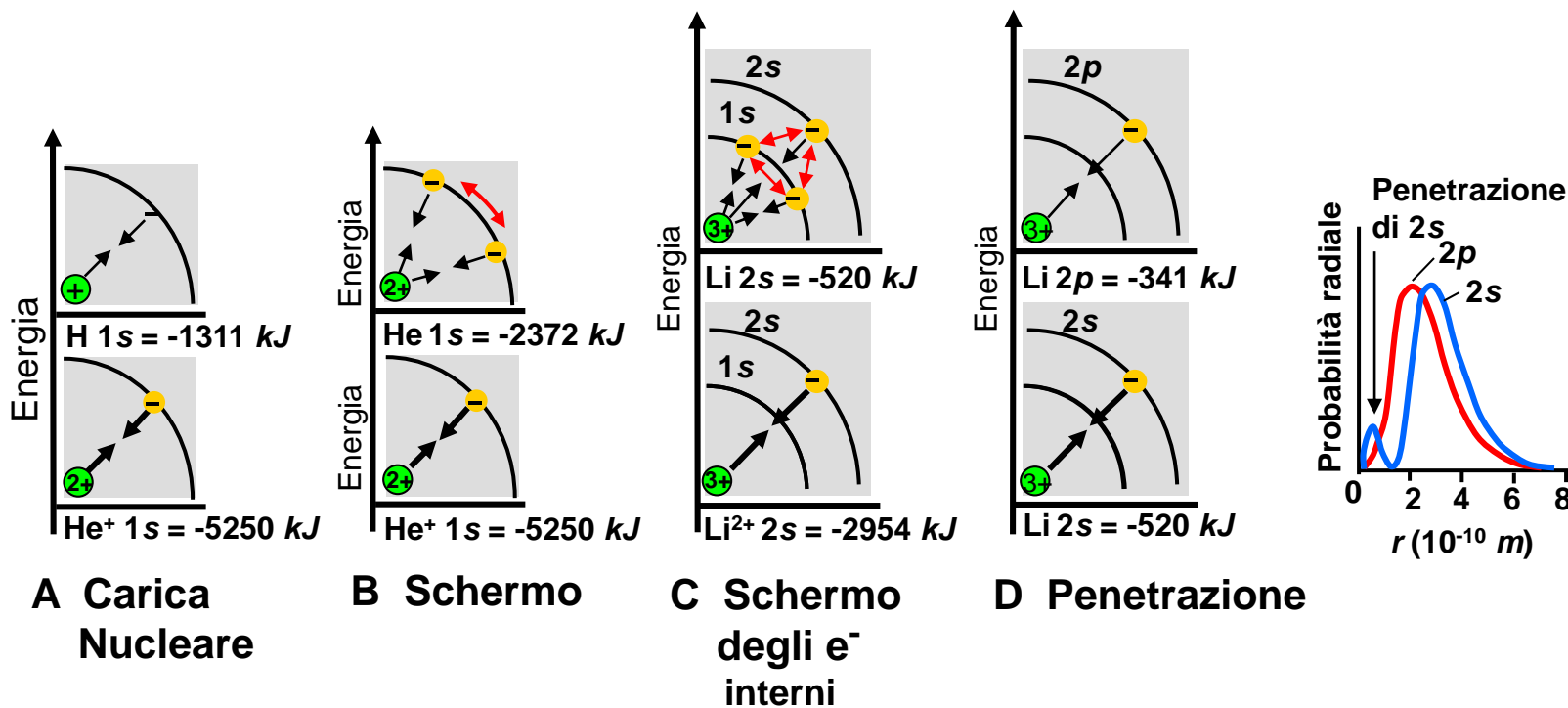
Gli elettroni di spin opposto possono occupare la stessa regione di spazio senza vistosi incrementi nella repulsione Coulombiana (che comunque rimane e crea effetti ben visibili in orbitali molto ravvicinati, come gli orbitali d).



Negli atomi con più di un elettrone, sussistono effetti elettrostatici (effetti dovuti all'attrazione o repulsione tra cariche opposte e uguali, rispettivamente).

- 1. Quando cariche opposte sono lontane, l'energia del sistema è più alta di quando sono più vicine.*
- 2. La repulsione o l'attrazione Coulombiana tra due particelle cariche aumenta quando aumenta l'entità della carica su una delle due particelle.*

A causa delle interazioni elettrostatiche, l'energia di un orbitale dipende non solo dal valore di n , ma in parte anche dal valore di l che determina la forma dell'orbitale.



1) L'effetto della carica nucleare (Z) sull'energia dell'orbitale

He⁺ e H hanno un elettrone ma He⁺ ha 2 protoni, per cui la forza attrattiva sull'elettrone è superiore:

Energia (Livello energetico) = - Energia di Ionizzazione :

$$\text{He}^+ = - 5250 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \qquad \text{H} = - 1311 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

2) L'effetto di un elettrone aggiuntivo sull'energia dell'orbitale

He ha due elettroni, mentre He⁺ ne ha solo uno, la repulsione risultante degli elettroni nell'orbitale dell'He porta ad una energia superiore dell'orbitale (numero più piccolo negativo).

$$E \text{ per He}^+ = - 5250 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$E \text{ per He} = - 2372 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

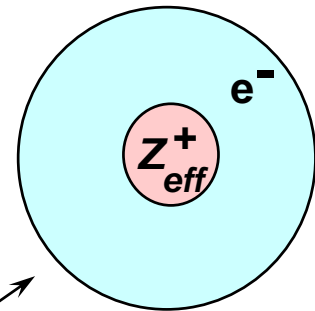
3) L'effetto degli elettroni interni sull'energia dell'orbitale esterno

- Gli elettroni interni (1s) schermano gli elettroni esterni (2s) dalla forza attrattiva complessiva del nucleo, rendendo l'orbitale 2s di energia superiore.
- Questo **schermo** significa che la **carica nucleare effettiva (Z_{eff})**, la carica nucleare che un elettrone di fatto risente, è minore per un elettrone in un orbitale esterno.

$$E \text{ di H } 1s = - 1311 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$E \text{ di Li } 2s = - 520 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\text{Energia} = \frac{k(Z_{eff})^2}{n^2}$$



4) L'effetto della forma dell'orbitale (valore l) sull'energia dell'orbitale

A causa delle differenti forme, un elettrone $2p$ è, in media, lievemente più lontano dal nucleo di un elettrone $2s$. Perciò, l'elettrone $2p$ è attratto meno fortemente ed è ad energia più alta.

Inoltre, l'elettrone $2s$ ha anche una piccola probabilità di “**penetrazione**” molto vicino al nucleo, contribuendo a schermare l'elettrone $2p$, e portando a valori più alti l'energia dell'elettrone $2p$.



Carica Nucleare Effettiva (Z_{eff}) per l'Atomo di Sodio - Na (Dedotte da Dati Sperimentali Spettroscopici)

n	8	1.20	1.12	1.002	1.000
	7	1.24	1.14	1.002	1.000
	6	1.29	1.17	1.002	1.000
	5	1.37	1.21	1.003	1.000
	4	1.51	1.28	1.003	1.000
	3	1.84	1.42	1.003	
		orbitali s	orbitali p	orbitali d	orbitali f
		<i>più penetranti</i>			<i>meno penetranti</i>
		0	1	2	3

l

Cariche Nucleari Effettive - Elementi 1-36

 Z_{eff}

El.	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d
H	1.000						
He	1.688						
Li	2.691	1.279					
Be	3.685	1.912					
B	4.680	2.576	2.421				
C	5.673	3.217	3.136				
N	6.665	3.847	3.834				
O	7.658	4.492	4.453				
F	8.650	5.128	5.100				
Ne	9.642	5.758	5.758				
Na	10.626	6.571	6.802	2.507			
Mg	11.619	7.392	7.826	3.308			
Al	12.591	8.214	8.963	4.117	4.066		
Si	13.575	9.020	9.945	4.936	4.285		
P	14.558	9.825	10.961	5.642	4.886		
S	15.541	10.629	11.977	6.367	5.482		
Cl	16.524	11.430	12.993	7.068	6.116		
Ar	17.508	12.230	14.008	7.757	6.761		
K	18.490	13.006	15.027	8.680	7.726	3.495	
Ca	19.473	13.776	16.041	9.602	8.658	4.398	
Sc	20.457	14.574	17.055	10.340	9.406	4.632	7.120
Ti	21.441	15.181	18.065	11.033	10.104	4.817	8.141
.....							

EFFETTO DI SCHERMO DEGLI ELETTRONI SULLA CARICA NUCLEARE

- (1) Orbitali suddivisi in gruppi:
(1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d)
(4s,4p) (4d) (4f) (5s,5p) ...
- (2) Elettroni in ogni gruppo a destra non contribuisce
- (3) Ogni altro elettrone nel livello (n_s, n_p) scherma quello di valenza di 0.35
- (4) Tutti gli elettroni nel livello $n-1$ schermano di 0.85.
- (5) Tutti gli elettroni in $n-2$ o inferiori schermano di 1.00.

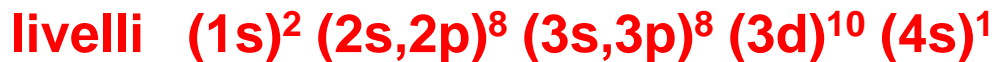
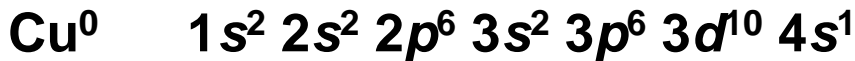
Per elettroni n_d o n_f si usano le stesse regole sostituendo la N°4 e N°5 con:

- (6) Tutti gli elettroni a sinistra dei gruppi n_d o n_f contribuiscono 1.00 .

Esempio di Calcolo di Z_{eff}

Calcolare la carica nucleare effettiva sentita dagli elettroni di valenza in Cu^0 e Cu^{2+} .

Configurazione Elettronica :



$$S = 2(1.00) + 8(1.00) + 18(0.85) = 25.3$$

$$Z_{\text{eff}} = 29 - 25.3 = \underline{3.7}$$



$$S = 2(1.00) + 8(1.00) + 8(0.85) + 8(0.35) = 19.6$$

$$Z_{\text{eff}} = 29 - 19.6 = \underline{9.4}$$

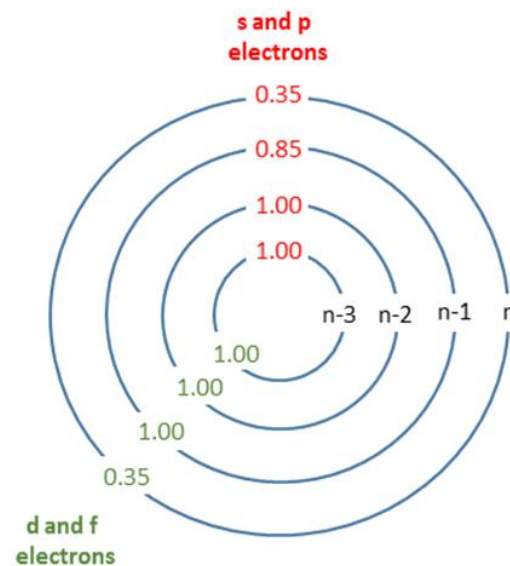
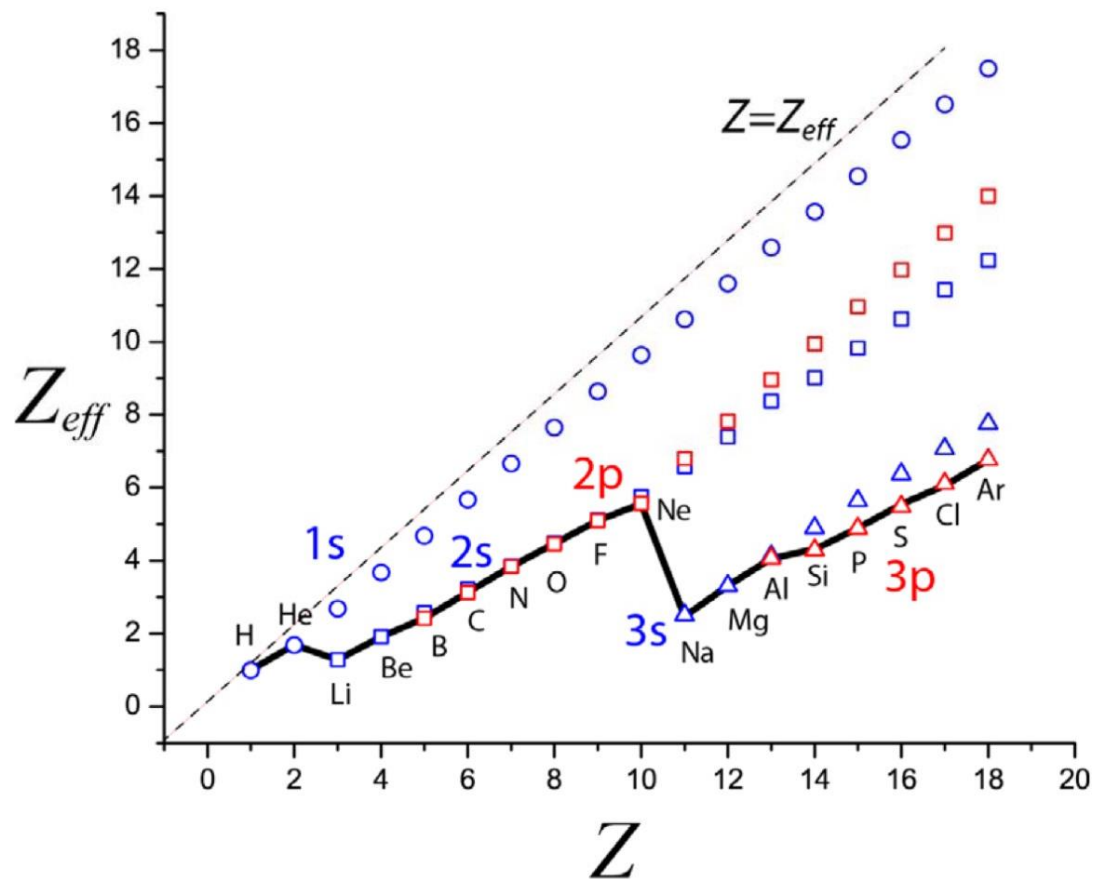
2,8
6,8
8
2

Altri Esempi di Calcolo di Z_{eff}

- Ossigeno: $(1s^2)(2s^22p^4)$
 - $Z_{\text{eff}} = Z - S = 8 - 2(0.85) - 5(0.35) = 4.55$
 - Ultimo e^- trattenuto con il $4.55/8.00 = 57\%$ della forza attesa per il nucleo $8+$.
- Nichel: $(1s^2)(2s^22p^6)(3s^23p^6)(3d^8)(4s^2)$
 - $Z_{\text{eff}} = 28 - 10(1.00) - 16(0.85) - 1(0.35) = 4.05$ per l'elettrone $4s$
 - Ni^{2+} perde prima gli elettroni $4s^2$, non gli elettroni $3d$ (metallo d^8)

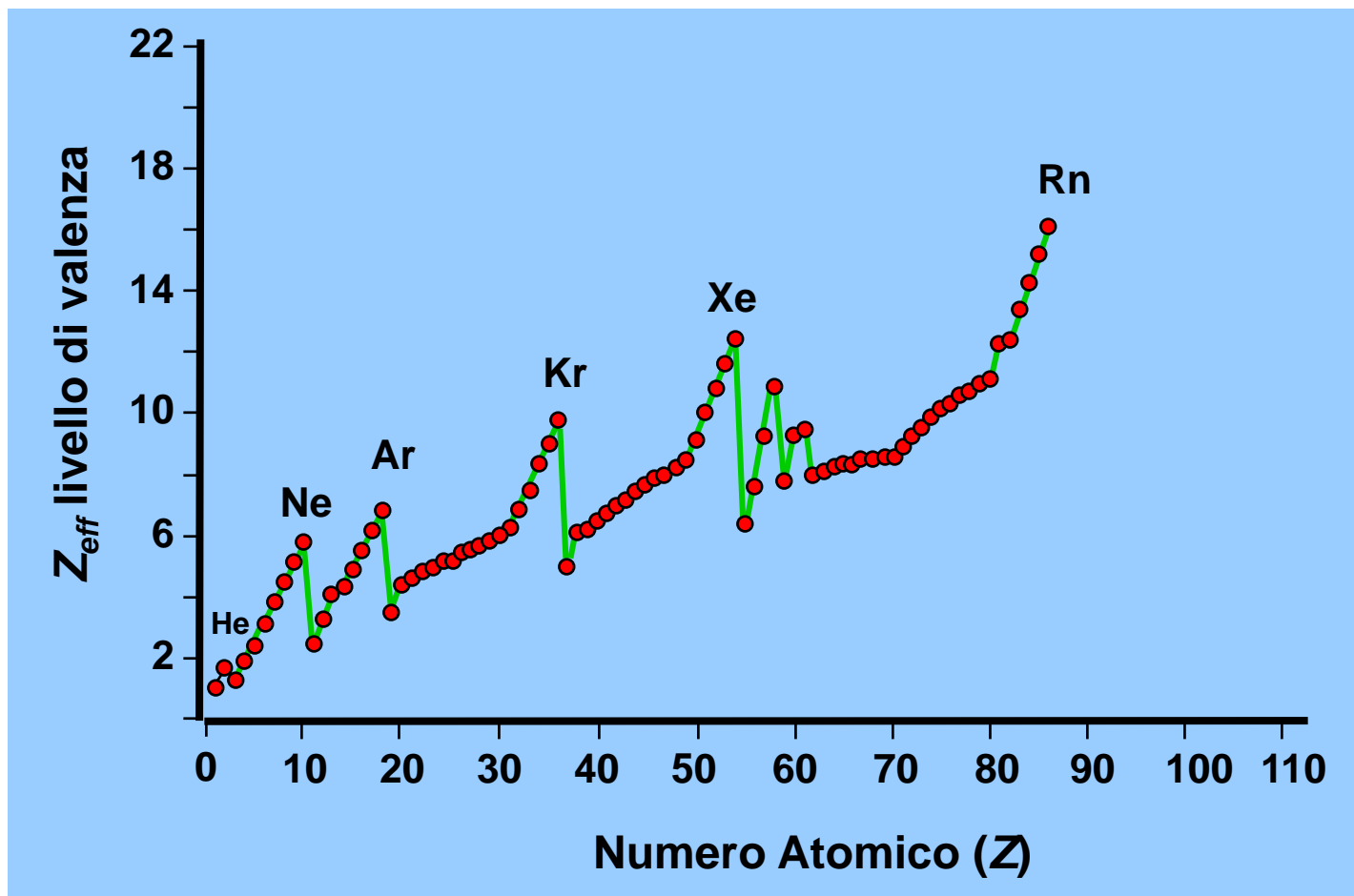


Andamento di Z_{eff} in funzione di Z per i primi 4 orbitali e del tipo (s,p) e (d,f)





Andamento Periodico di Z_{eff}



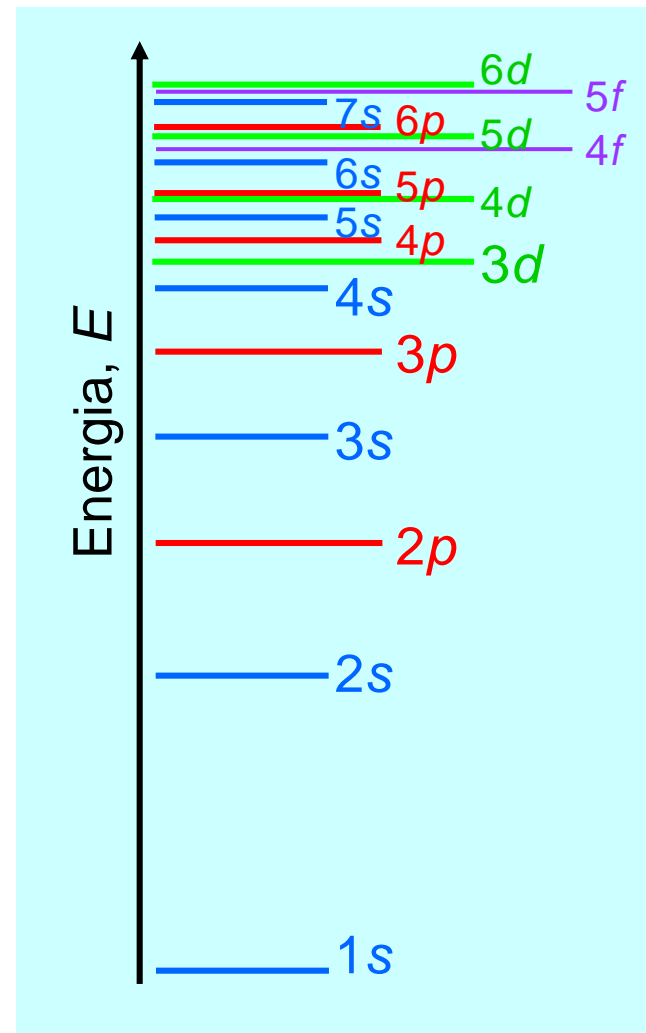


Nel riempire i livelli con gli elettroni, partire prima inserendo gli elettroni nei livelli ad energia più bassa.

L'ordine in energia è

$n: 1 < 2 < 3 < \dots$

$l: s < p < d < f \dots$





Configurazioni Elettroniche

- Le configurazioni elettroniche ci dicono in quali orbitali si vanno a localizzare gli elettroni di un elemento.
- **Tre regole:**
 1. Gli elettroni riempiono gli orbitali a partire dall' n più basso e al crescere di n ;
 2. I due elettroni che possono riempire un orbitale non possono avere lo stesso spin (**Pauli**);
 3. per orbitali degeneri (stessa energia), gli elettroni riempiono ogni orbitale singolarmente prima di entrare a coppie appaiate (**Regola di Hund**).

Quest'ultima regola prevede perciò che:

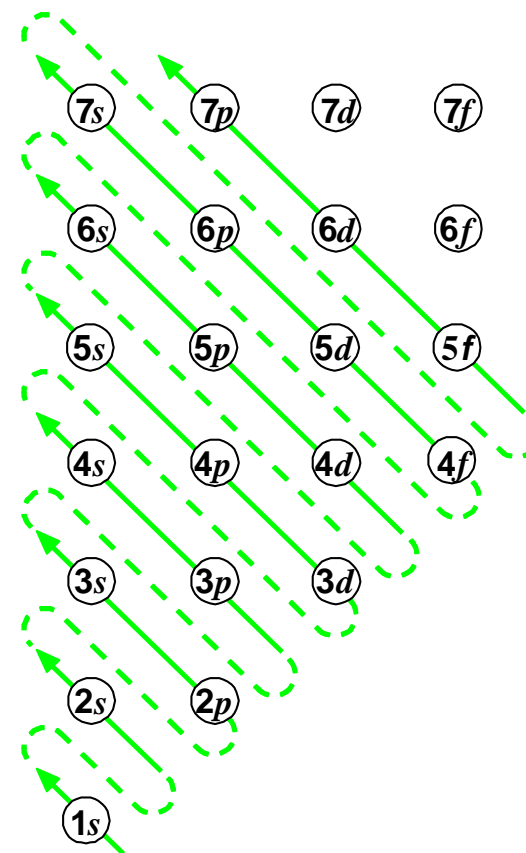
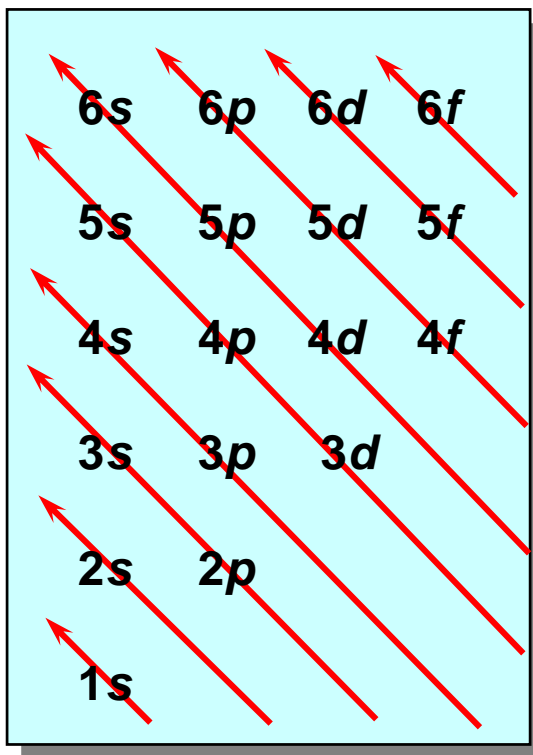
- Per un atomo nella configurazione del suo stato fondamentale, tutti gli elettroni spaiati hanno lo stesso orientamento degli spin.
- Pertanto gli elettroni tendono ad occupare tutti gli orbitali liberi e non ad appaiarsi, per cui i loro spin si sommano producendo un vettore magnetico risultante per l'atomo.



Sequenza Diagonale nell'Ordine di Riempimento degli Orbitali

L'energia degli orbitali in atomi plurielettronici dipende da $n + l$

Sequenza diagonale dei livelli



Configurazioni Elettroniche dei Gas Nobili

Orbitali Elettronici	N° Elettroni	Elemento
$1s^2$	2	He
$1s^2 2s^2 2p^6$	10	Ne
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	18	Ar
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$	36	Kr
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$	54	Xe



H	n = 1																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	Rn																												
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	107	108	109	110																																				
<table border="1"><tr><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td></tr><tr><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td></tr></table>																		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
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																																



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			Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	107	108	109	110										

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

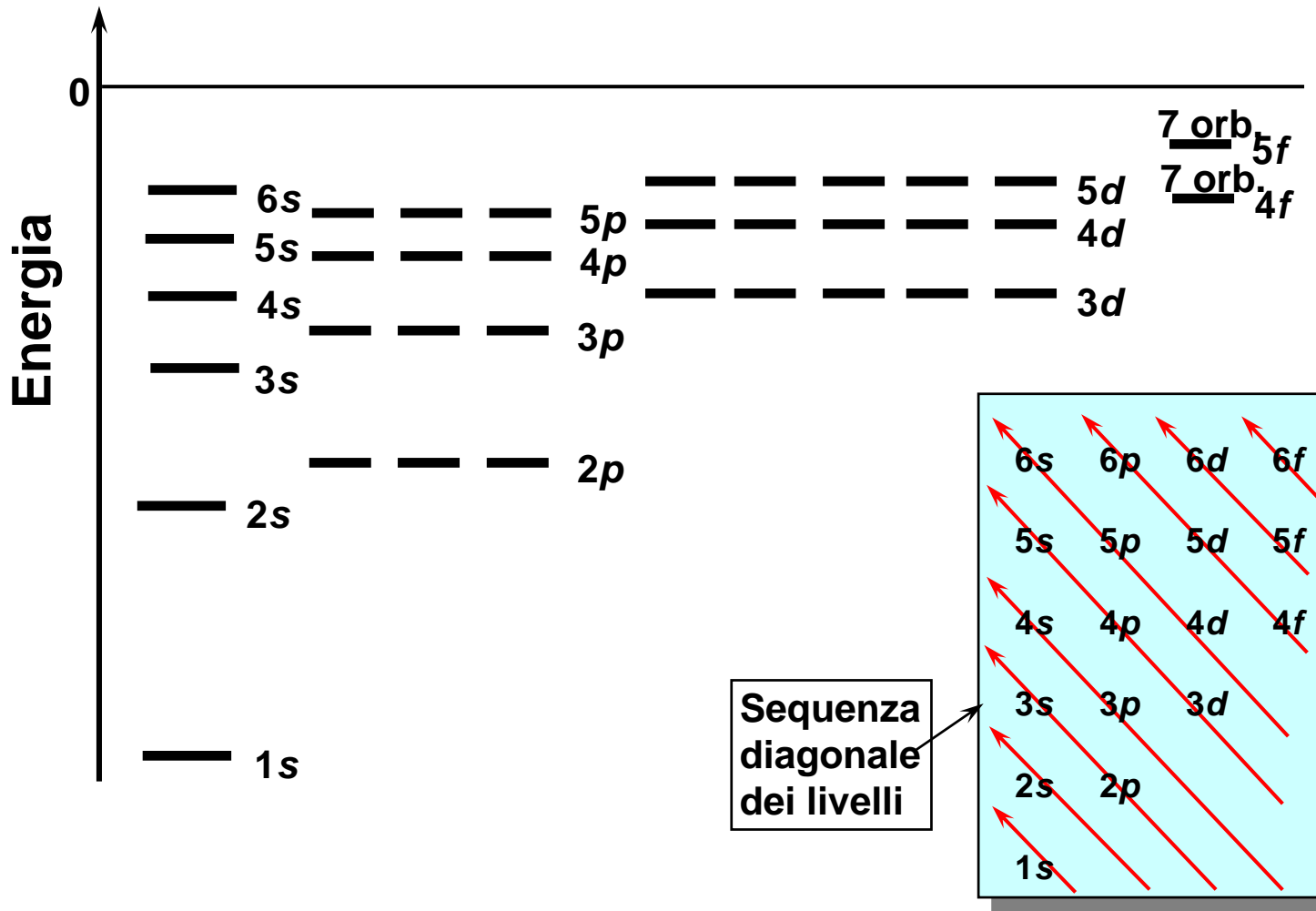
n = 2



- **Caratteristiche degli Atomi Pluri-elettronici**
- **Modello Quanto-Meccanico e Tabella Periodica**



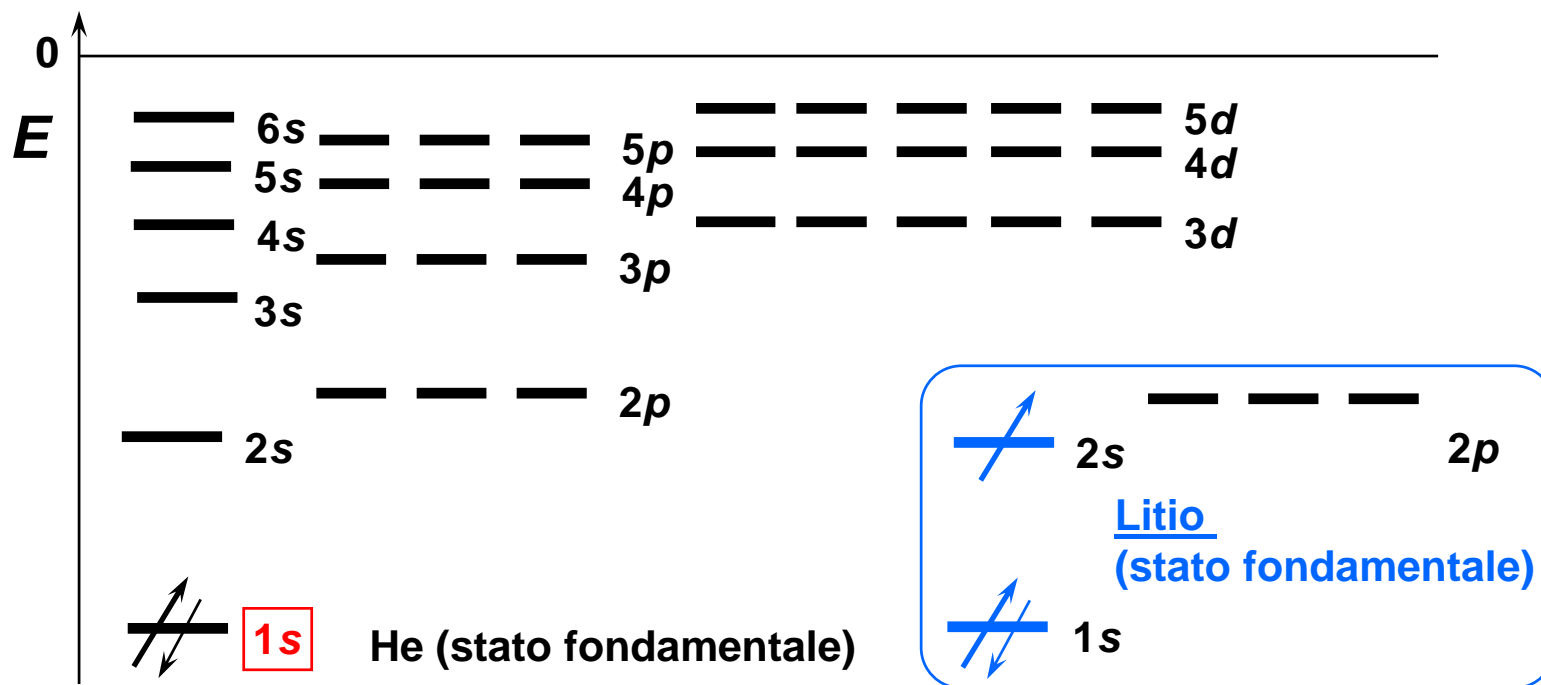
Ordine di Inserimento degli Elettroni (Atomo Secondo il Principio Aufbau)





• He $1s^2$
 $n = 1 \quad l = 0 \quad m_L = 0 \quad m_S = + 1/2$
 $n = 1 \quad l = 0 \quad m_L = 0 \quad m_S = - 1/2$

• Li $1s^2 2s^1$
 $n = 1 \quad l = 0 \quad m_L = 0 \quad m_S = + 1/2$
 $n = 1 \quad l = 0 \quad m_L = 0 \quad m_S = - 1/2$
 $n = 2 \quad l = 0 \quad m_L = 0 \quad m_S = - 1/2$

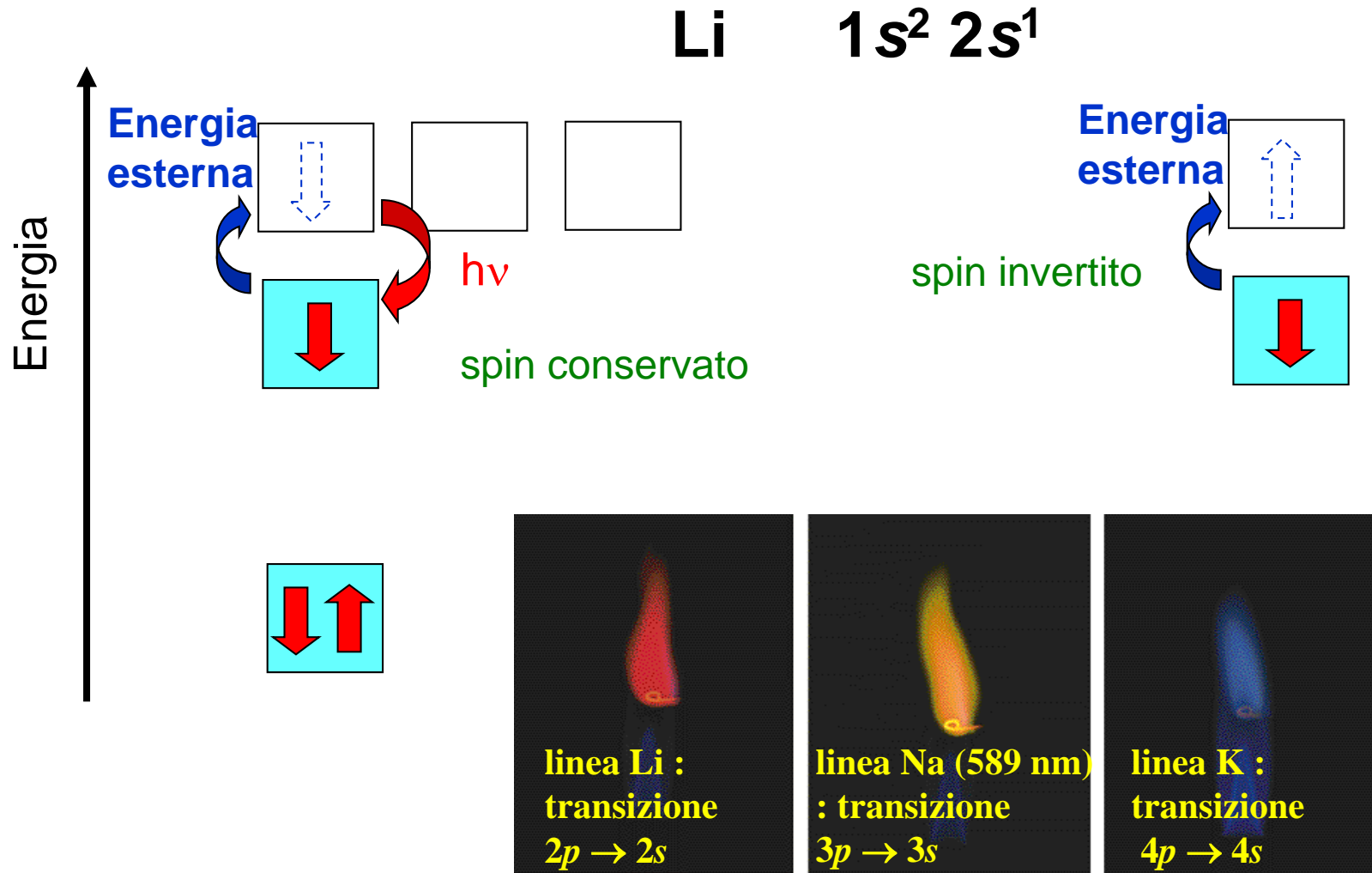




Simbolo dell'Elemento		Configurazione Elettronica	Diagrammi Orbitalici a Riquadri	
Idrogeno	H	$1s^1$	 1s	 2s
Elio	He	$1s^2$	 1s	 2s
Litio	Li	$1s^2 2s^1$	 1s	 2s
Berillio	Be	$1s^2 2s^2$	 1s	 2s



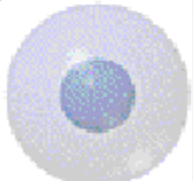
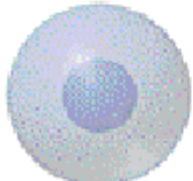
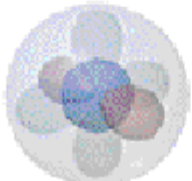
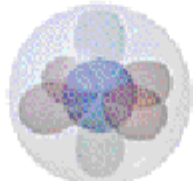


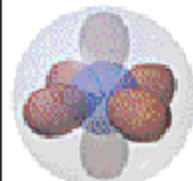



Diagramma Orbitalico per lo Stato Fondamentale del Li e Eccitazione Atomica



































Occupazione degli Orbitali dall'Idrogeno al Neon

	1A(1)		2A(2)	3A(13)	4A(14)	5A(15)	6A(16)	7A(17)	8A(18)
Period 1	1 H $1s^1$ 								2 He $1s^2$ 
Period 2	3 Li $1s^2 2s^1$ 	4 Be $1s^2 2s^2$ 	5 B $1s^2 2s^2 2p^1$ 	6 C $1s^2 2s^2 2p^2$ 	7 N $1s^2 2s^2 2p^3$ 	8 O $1s^2 2s^2 2p^4$ 	9 F $1s^2 2s^2 2p^5$ 	10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$ 	



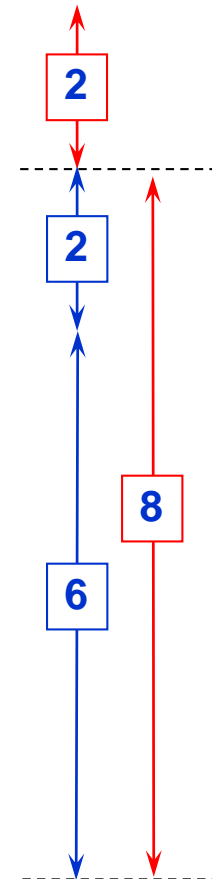
- **Per un atomo nella configurazione del suo stato fondamentale, tutti gli elettroni spaiati hanno lo stesso orientamento degli spin.**
- **Pertanto gli elettroni tendono ad occupare tutti gli orbitali liberi e non ad appaiarsi, per cui i loro spin si sommano producendo un vettore magnetico risultante per l'atomo.**

Diagrammi Orbitalici - II: B → Ne

Boro	B	$1s^2 2s^2 2p$					
			1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
Carbonio	C	$1s^2 2s^2 2p^2$					
			1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
Azoto	N	$1s^2 2s^2 2p^3$					
			1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
Ossigeno	O	$1s^2 2s^2 2p^4$					
			1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
Fluoro	F	$1s^2 2s^2 2p^5$					
			1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
Neon	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$					
			1s	2s	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$

Configurazioni Elettroniche

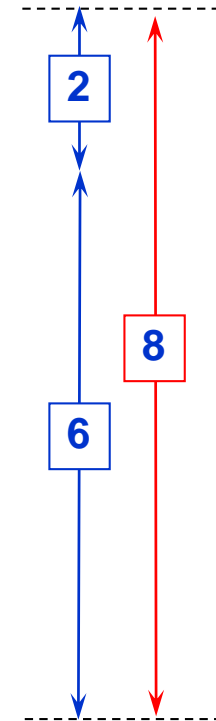
- H $1s^1$
- He $1s^2$ [He]
- Li $1s^2 2s^1$ [He] $2s^1$
- Be $1s^2 2s^2$ [He] $2s^2$
- B $1s^2 2s^2 2p^1$ [He] $2s^2 2p^1$
- C $1s^2 2s^2 2p^2$ [He] $2s^2 2p^2$
- N $1s^2 2s^2 2p^3$ [He] $2s^2 2p^3$
- O $1s^2 2s^2 2p^4$ [He] $2s^2 2p^4$
- F $1s^2 2s^2 2p^5$ [He] $2s^2 2p^5$
- Ne $1s^2 2s^2 2p^6$ [He] $2s^2 2p^6 = [\text{Ne}]$



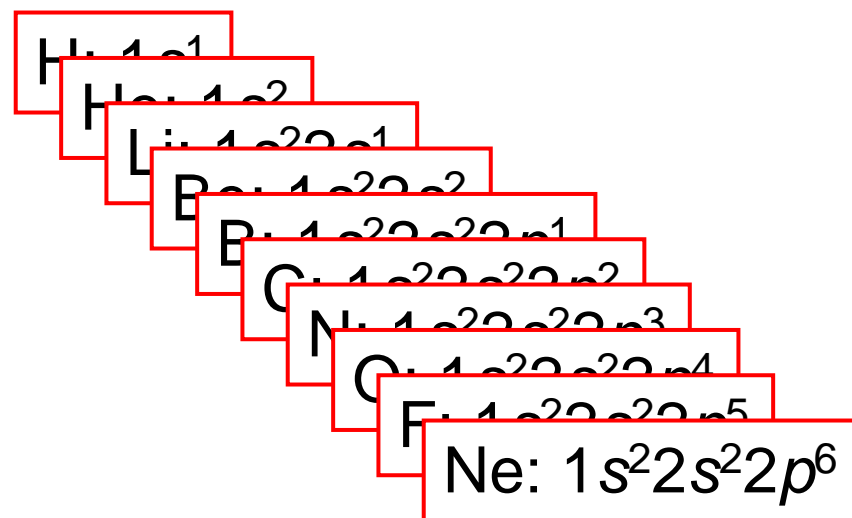
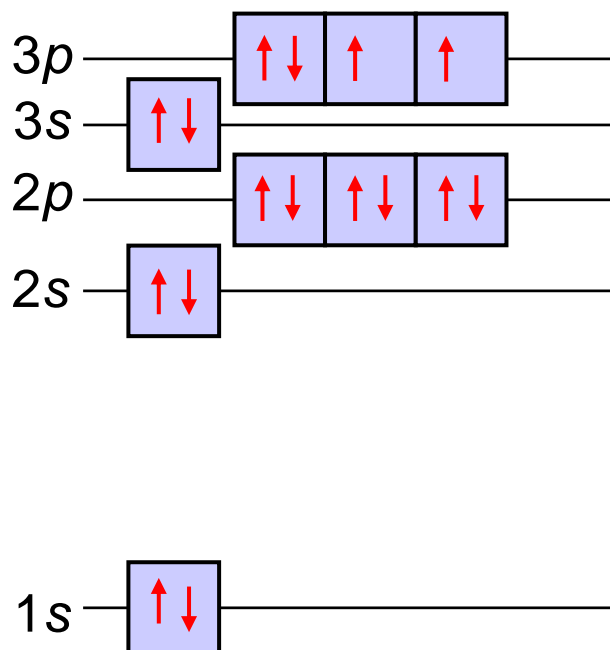


Configurazioni Elettroniche - II

- Na $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ [Ne] $2s^1$
- Mg [Ne] $2s^2$
- Al [Ne] $2s^2 2p^1$
- Si [Ne] $2s^2 2p^2$
- P [Ne] $2s^2 2p^3$
- S [Ne] $2s^2 2p^4$
- Cl [Ne] $2s^2 2p^5$
- Ar [Ne] $2s^2 2p^6 = [\text{Ar}]$



Principio dell'Aufbau (es. Zolfo)

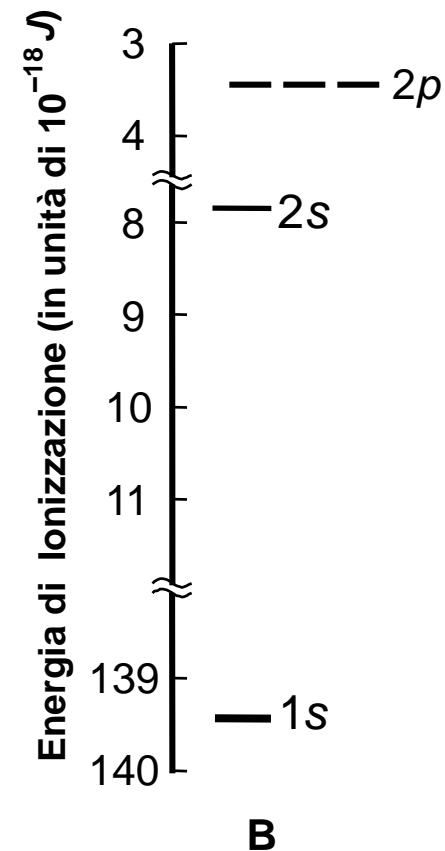
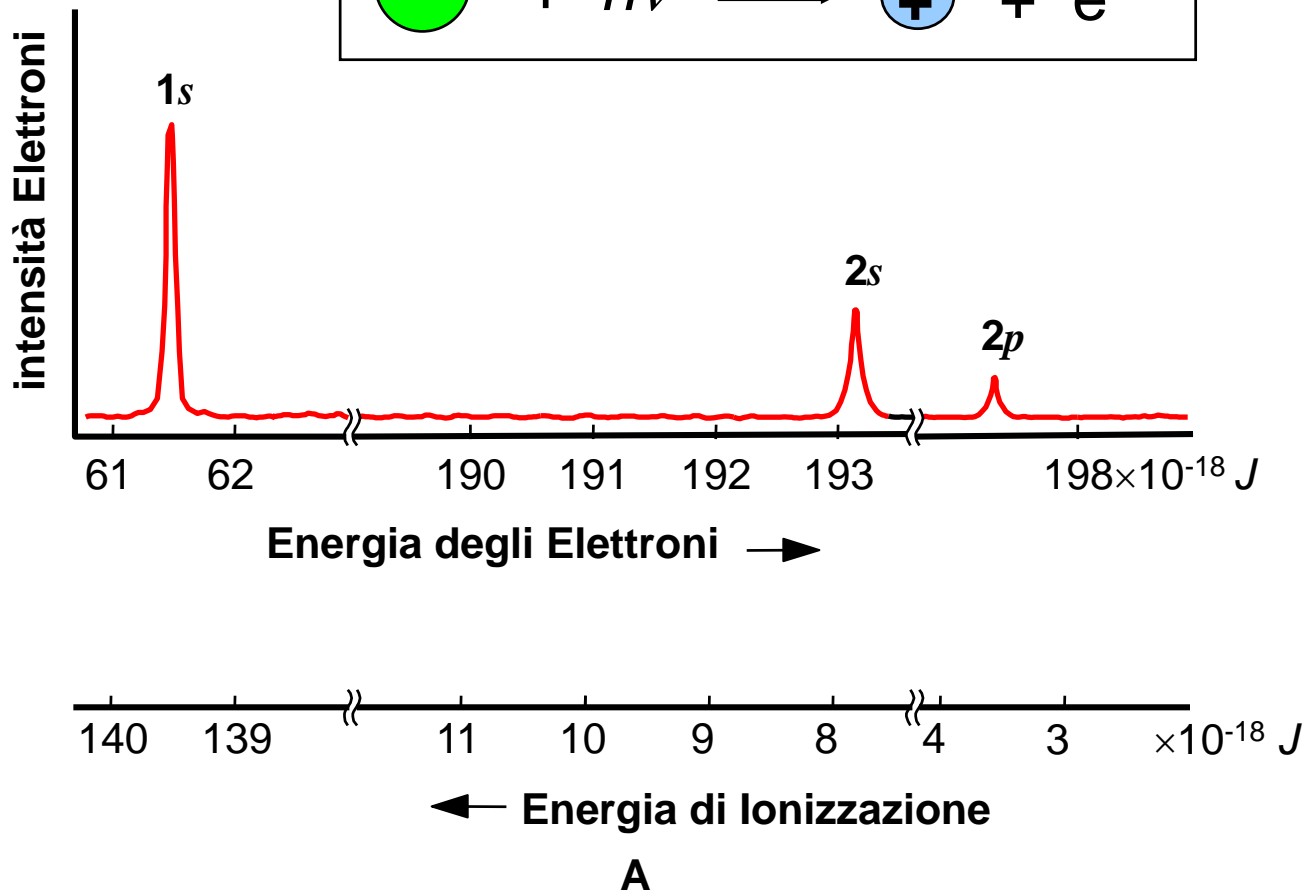
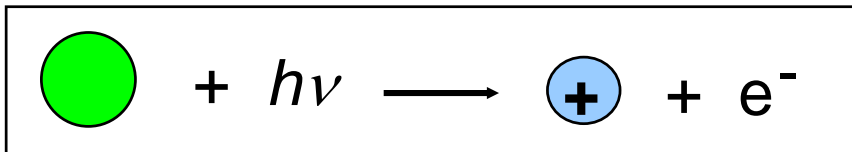


N.B.: Le due coppie elettroniche esterne dello zolfo non sono uguali (una s e una p)



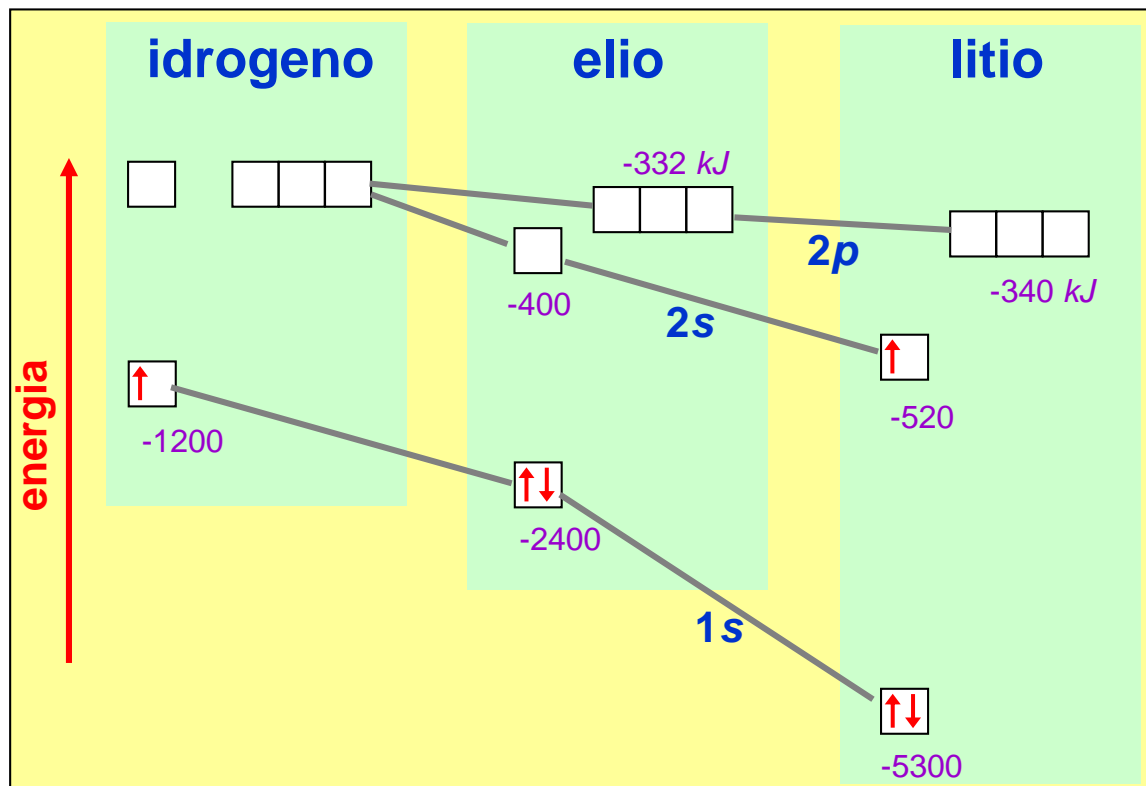
Energie degli Orbitali Atomici

(Spettroscopia Fotoelettronica di Ne $1s^2 2s^2 2p^6$)





Energie di Alcuni Orbitali (Relativi a quelli 2s-2p di H) di Atomi dei Primi Tre Elementi



Le energie degli orbitali 1s diminuiscono rapidamente al crescere di Z . La diminuzione nelle energie degli orbitali 2s è inferiore a causa della repulsione elettrone-elettrone. Gli orbitali 2p hanno un nodo sul nucleo e sono meno influenzati da Z ma sono più influenzati dalla repulsione elettronica, per cui sono a energia superiore a quella degli orbitali 2s.

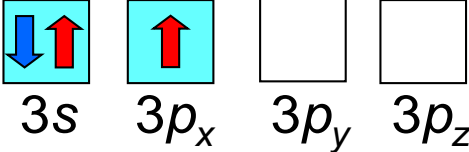
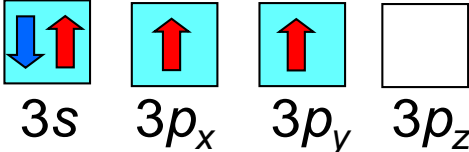
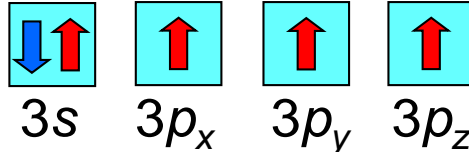
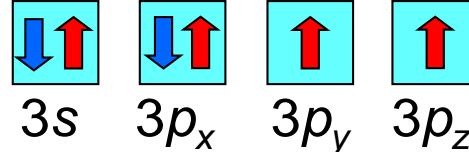
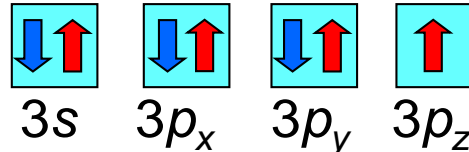
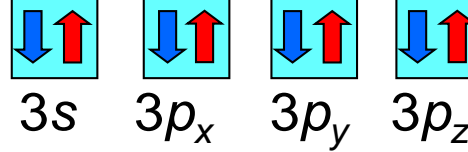


Configurazioni Elettroniche nello Stato Fondamentale nei Primi Tre Periodi

	1A (1)		2A (2)	2A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)
1	1 H $1s^1$								2 He $1s^2$
2	3 Li $[\text{He}]2s^1$	4 Be $[\text{He}]2s^2$	5 B $[\text{He}]2s^22p^1$	6 C $[\text{He}]2s^22p^2$	7 N $[\text{He}]2s^22p^3$	8 O $[\text{He}]2s^22p^4$	9 F $[\text{He}]2s^22p^5$	10 Ne $[\text{He}]2s^22p^6$	
3	11 Na $[\text{Ne}]3s^1$	12 Mg $[\text{Ne}]3s^2$	13 Al $[\text{Ne}]3s^23p^1$	14 Si $[\text{Ne}]3s^23p^2$	15 P $[\text{Ne}]3s^23p^3$	16 S $[\text{Ne}]3s^23p^4$	17 Cl $[\text{Ne}]3s^23p^5$	18 Ar $[\text{Ne}]3s^23p^6$	

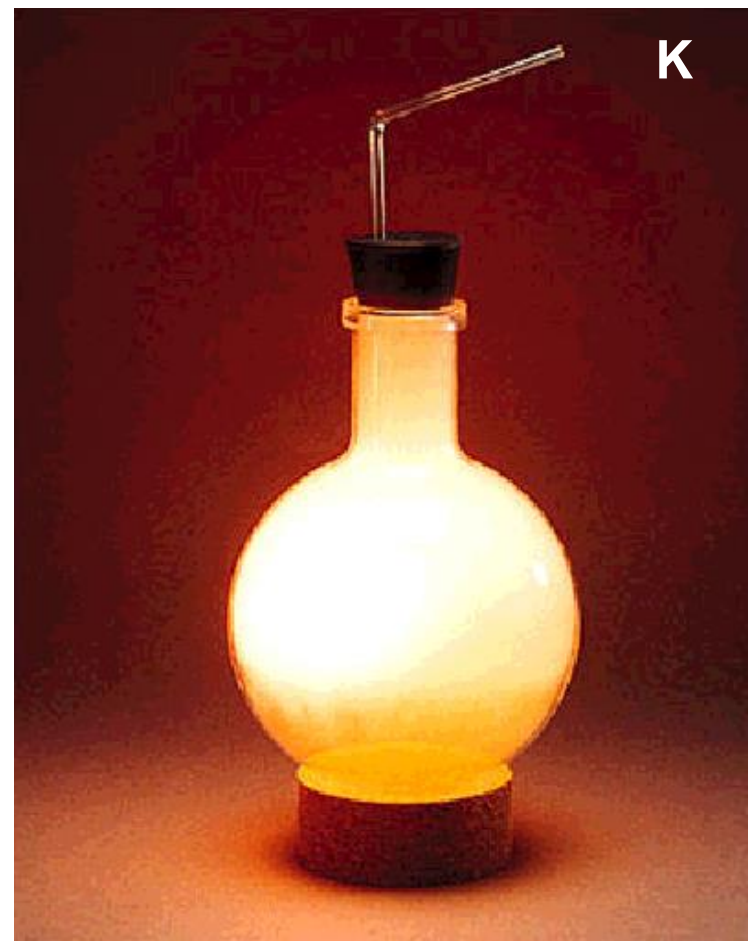
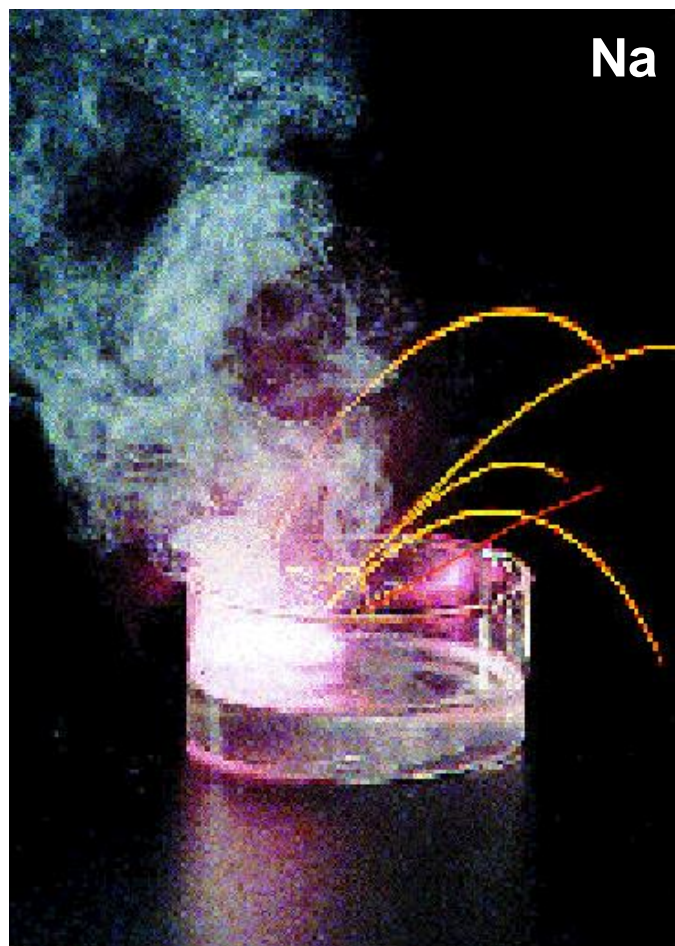


Diagrammi Orbitalici - III: Al → Ar

Alluminio	Al	[Ne] $2s^2 2p$	
Silicio	Si	[Ne] $2s^2 2p^2$	
Fosforo	P	[Ne] $2s^2 2p^3$	
Zolfo	S	[Ne] $2s^1 2p^4$	
Cloro	F	[Ne] $2s^2 2p^5$	
Argon	Ne	[Ne] $2s^2 2p^6$	

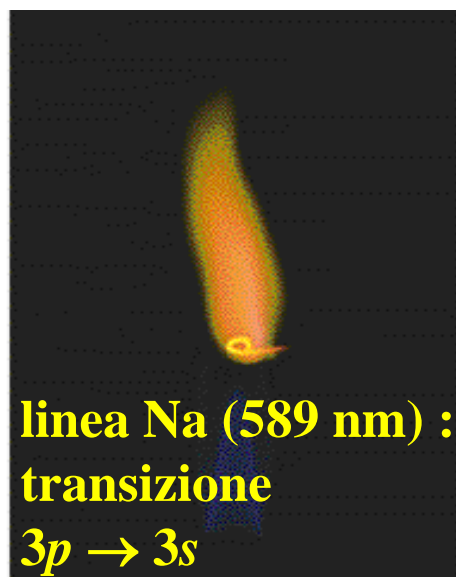


Reattività Simile all'Interno del Gruppo



Ma ... Proprietà Fini Differenti

- Per esempio le transizioni dall'orbitale s che cadono nel visibile sono caratterizzate da lunghezze d'onda diverse (originano cioè colori diversi se eccitate alla fiamma). E' l'indizio che lo spostamento dell'elettrone " s " che domina la reattività dei metalli alcalini non è identico e ciò spiega perché questi metalli mostrino diversa reattività per esempio con le molecole di azoto e di ossigeno.



Configurazioni Elettroniche, K \rightarrow Zn

- K [Ar] 4s¹
- Ca [Ar] 4s²
- Sc [Ar] 4s² 3d¹
- Ti [Ar] 4s² 3d²
- V [Ar] 4s² 3d³
- **Cr [Ar] 4s¹ 3d⁵**
- Mn [Ar] 4s² 3d⁵
- Fe [Ar] 4s² 3d⁶
- Co [Ar] 4s² 3d⁷
- Ni [Ar] 4s² 3d⁸
- **Cu [Ar] 4s¹ 3d¹⁰**
- Zn [Ar] 4s² 3d¹⁰

**Ordine di
Riempimento
Anomalo**

**Ordine di
Riempimento
Anomalo**



Diagrammi Orbitalici IV: Sc → Zn

			4s			3d		
Scandio	Sc	[Ar] 4s ² 3d ¹						
Titanio	Ti	[Ar] 4s ² 3d ²						
Vanadio	V	[Ar] 4s ² 3d ³						
Cromo	Cr	[Ar] 4s ¹ 3d ⁵						
Manganese	Mn	[Ar] 4s ² 3d ⁵						
Ferro	Fe	[Ar] 4s ² 3d ⁶						
Cobalto	Co	[Ar] 4s ² 3d ⁷						
Nichel	Ni	[Ar] 4s ² 3d ⁸						
Rame	Cu	[Ar] 4s ¹ 3d ¹⁰						
Zinco	Zn	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰						



Configurazioni Elettroniche, Ga \rightarrow Kr

- Ga $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^1$
- Ge $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^2$
- As $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^3$
- Se $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^4$
- Br $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^5$
- Kr $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^6 = [\text{Kr}]$

Configurazioni Elettroniche, K → Kr

N. Atomico	Elemento	Simbolo	Configurazione Elettronica			
19	POTASSIO	K	Ar	4s ¹		
20	CALCIO	Ca	Ar	4s ²		
21	SCANDIO	Sc	Ar	4d ¹	4s ²	
22	TITANIO	Ti	Ar	4d ²	4s ²	
23	VANADIO	V	Ar	4d ³	4s ²	
24	CROMO	Cr	Ar	4d ⁵	4s ¹	
25	MANGANESE	Mn	Ar	4d ⁵	4s ²	
26	FERRO	Fe	Ar	4d ⁶	4s ²	
27	COBALTO	Co	Ar	4d ⁷	4s ²	
28	NICHEL	Ni	Ar	4d ⁸	4s ²	
29	RAME	Cu	Ar	4d ¹⁰	4s ¹	
30	ZINCO	Zn	Ar	4d ¹⁰	4s ²	
31	GALLIO	Ga	Ar	3d ¹⁰	4s ²	4p ¹
32	GERMANIO	Ge	Ar	3d ¹⁰	4s ²	4p ²
33	ARSENICO	As	Ar	3d ¹⁰	4s ²	4p ³
34	SELENIO	Se	Ar	3d ¹⁰	4s ²	4p ⁴
35	BROMO	Br	Ar	3d ¹⁰	4s ²	4p ⁵
36	KRIPTON	Kr	Ar	3d ¹⁰	4s ²	4p ⁶

18

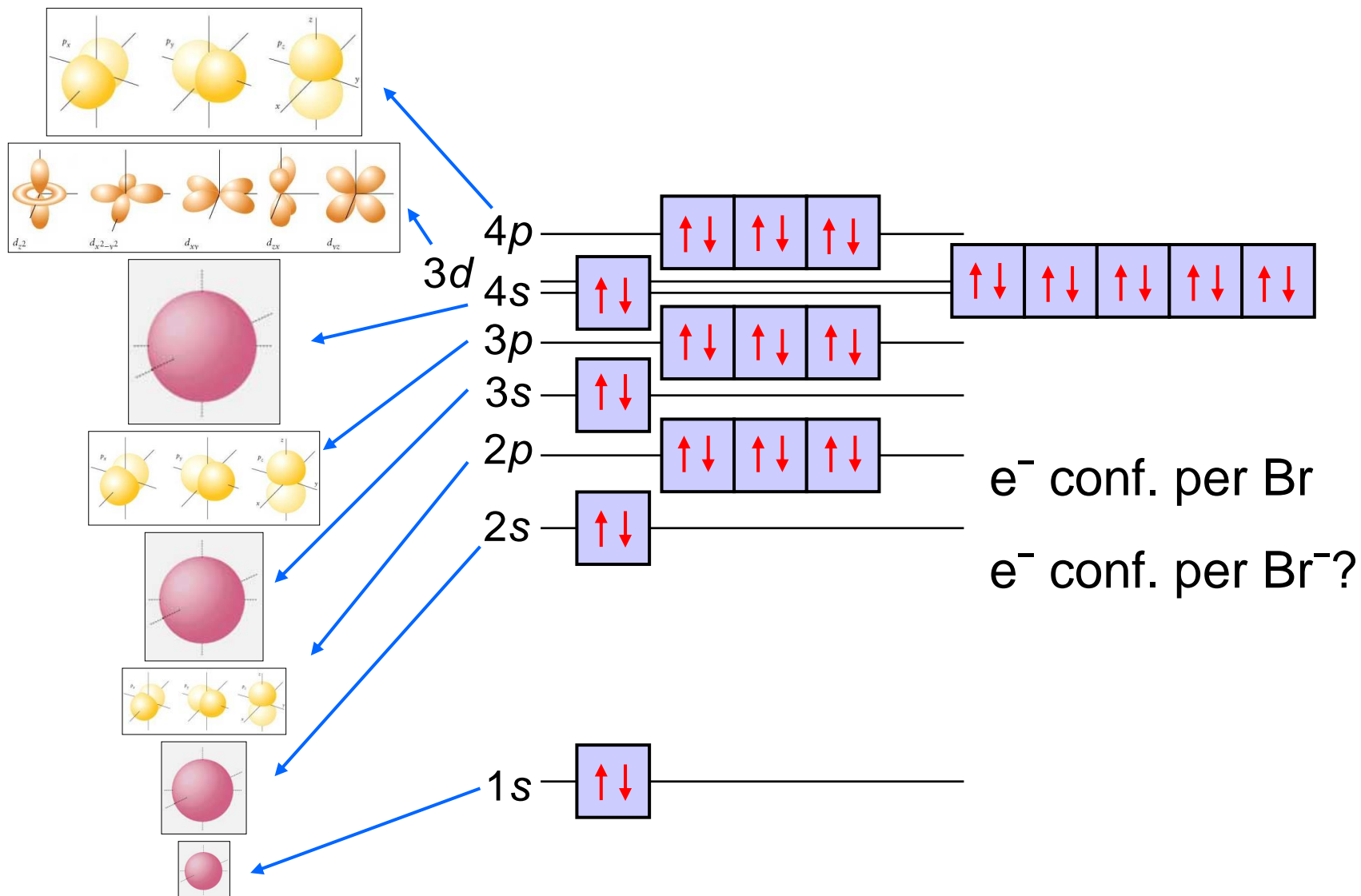
2

10

6



Aufbau per l'Atomo di Bromo (Br^{\cdot}) e per lo Ione Bromuro (Br^{-})



Configurazioni Elettroniche Rb → Cd

• Rb	[Kr] 5s ¹	
• Sr	[Kr] 5s ²	
• Y	[Kr] 5s ² 4d ¹	
• Zr	[Kr] 5s ² 4d ²	
• Nb	[Kr] 5s¹ 4d⁴	Ordine di Riempimento Anomalo
• Mo	[Kr] 5s¹ 4d⁵	
• Tc	[Kr] 5s ² 4d ⁶	
• Ru	[Kr] 5s¹ 4d⁷	Ordine di Riempimento Anomalo
• Rh	[Kr] 5s¹ 4d⁸	
• Pd	[Kr] 4d ¹⁰	
• Ag	[Kr] 5s¹ 4d¹⁰	Ordine di Riempimento Anomalo
• Cd	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰	



Configurazioni Elettroniche : Cs → Lu

• Cs	[Xe] 6s ¹	
• Ba	[Xe] 6s ²	
• La	[Xe] 6s ² 5d ¹	
• Ce	[Xe] 6s² 5d¹ 4f¹	← Ordine di Riempimento Anomalo
• Pr	[Xe] 6s ² 4f ³	
• Nd	[Xe] 6s ² 4f ⁴	
• Pm	[Xe] 6s ² 4f ⁵	
• Sm	[Xe] 6s ² 4f ⁶	
• Eu	[Xe] 6s ² 4f ⁷	
• Gd	[Xe] 6s² 5d¹ 4f⁷	← Ordine di Riempimento Anomalo
• Tb	[Xe] 6s ² 4f ⁹	
• Dy	[Xe] 6s ² 4f ¹⁰	
• Ho	[Xe] 6s ² 4f ¹¹	
• Er	[Xe] 6s ² 4f ¹²	
• Tm	[Xe] 6s ² 4f ¹³	
• Yb	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴	
• Lu	[Xe] 6s² 5d¹ 4f¹⁴	← Ordine di Riempimento Anomalo



Configurazioni Elettroniche : Hf - Rn

- Hf [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d²
- Ta [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d³
- W [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d⁴
- Re [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d⁵
- Os [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d⁶
- Ir [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d⁷
- Pt [Xe] 6s¹ 4f¹⁴ 5d⁹
- Au [Xe] 6s¹ 4f¹⁴ 5d¹⁰
- Hg [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰
- Tl [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6p¹
- Pb [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6p²
- Bi [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6p³
- Po [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6p⁴
- At [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6p⁵
- Rn [Xe] 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6p⁶ = [Rn]

Ordine di Riempimento
Anomalo



- Fr [Rn] 7s¹
- Ra [Rn] 7s²
- Ac [Rn] 7s² 6d¹
- Th [Rn] 7s² 6d²
- Pa [Rn] 7s² 5f² 6d¹
- U [Rn] 7s² 5f³ 6d¹
- Np [Rn] 7s² 5f⁴ 6d¹
- Pu [Rn] 7s² 5f⁶
- Am [Rn] 7s² 5f⁷
- Cm [Rn] 7s² 5f⁷ 6d¹
- Bk [Rn] 7s² 5f⁹
- Cf [Rn] 7s² 5f¹⁰
- Es [Rn] 7s² 5f¹¹
- Fm [Rn] 7s² 5f¹²
- Md [Rn] 7s² 5f¹³
- No [Rn] 7s² 5f¹⁴
- Lr [Rn] 7s² 5f¹⁴ 6d¹

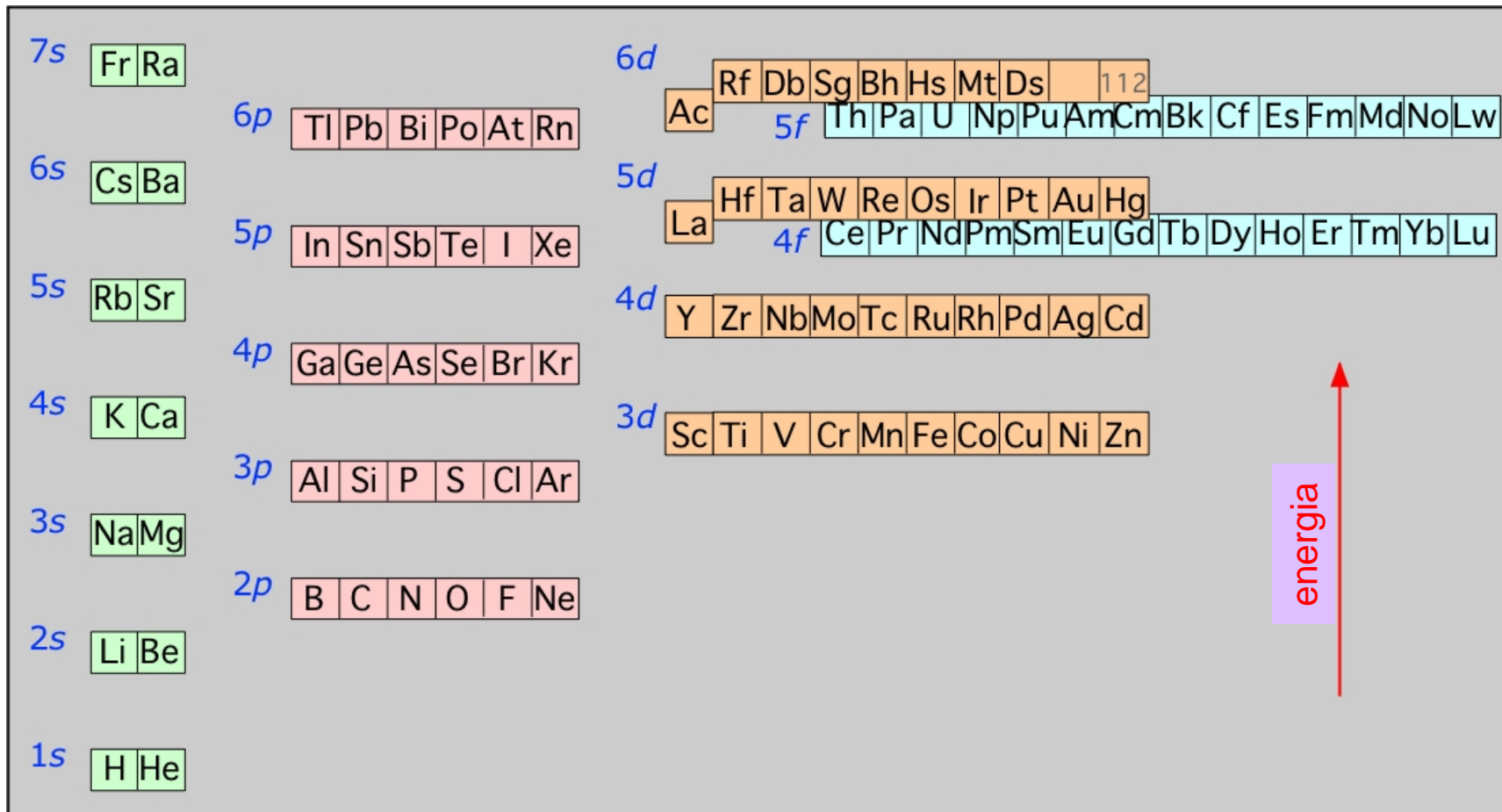
Ordine di Riempimento
Anomalo

Ordine di Riempimento
Anomalo

Ordine di Riempimento
Anomalo



Schematizzazione delle Configurazioni Elettroniche Fondamentali di Tutti gli Elementi



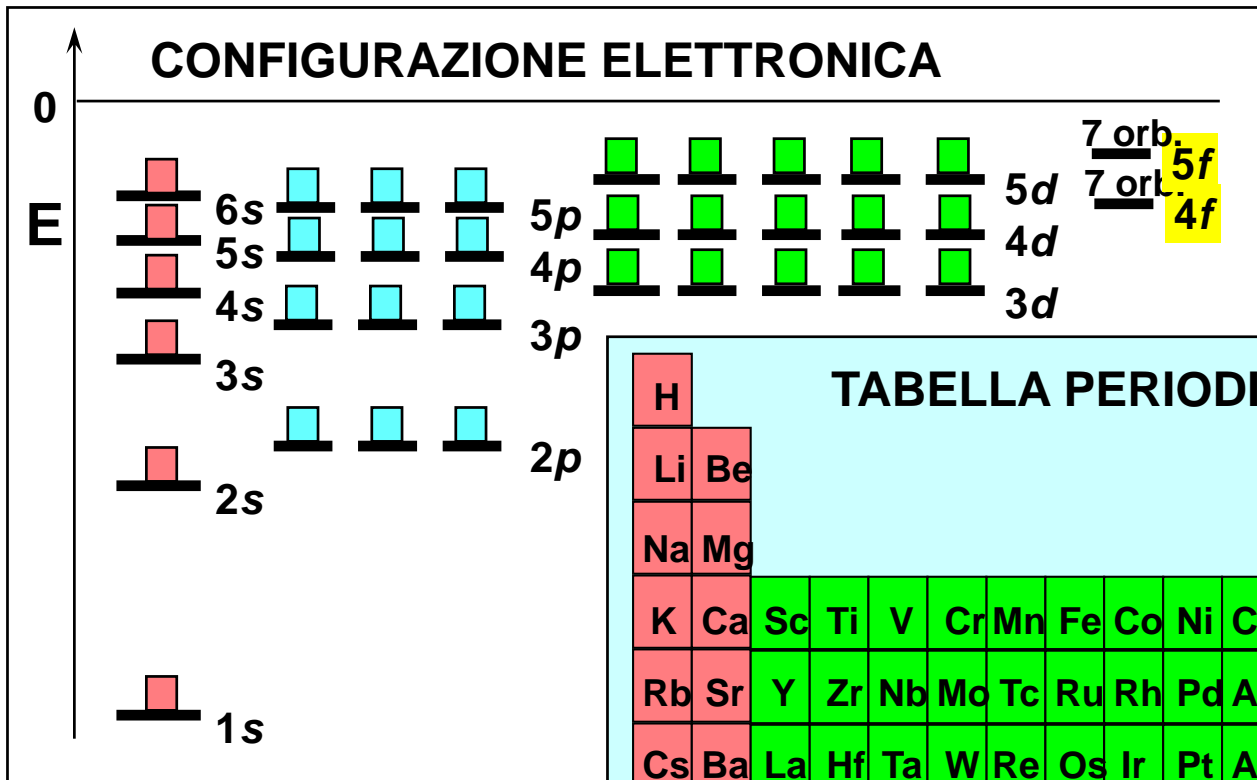


TABELLA PERIODICA

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	Rn
Fr	Ra	Ac															
		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		



Tabella Periodica degli Elementi - Anomalie nel Riempimento Elettronico

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

*	Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70	Lu 71
**	Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103

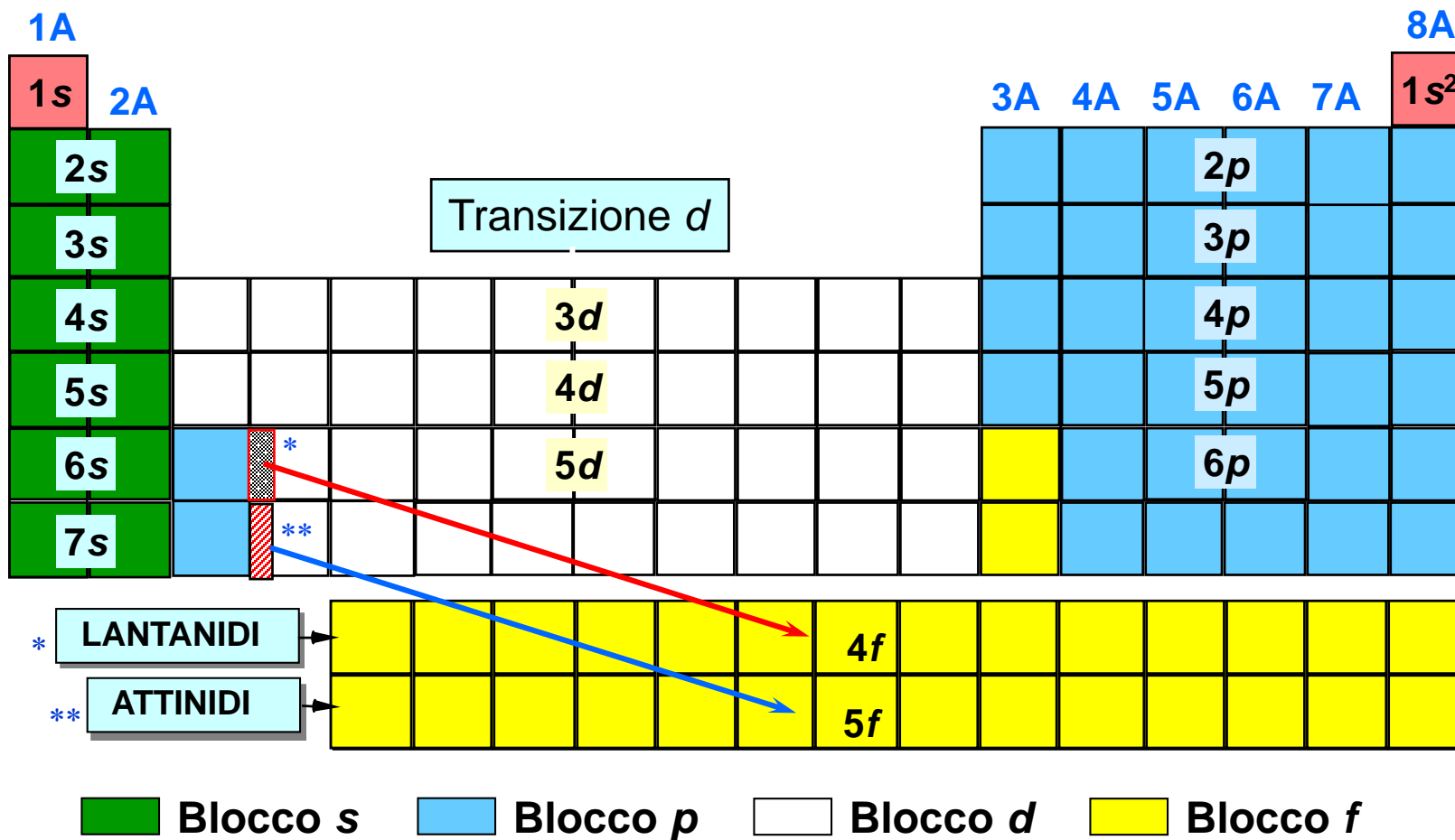


Tabella Periodica degli Elementi

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII (Transizione)	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA			
1 H 1.008														2 He 4.003			
3 Li 6.939	4 Be 9.012									5 B 10.81	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.179		
11 Na 22.99	12 Mg 24.31									13 Al 26.981	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95		
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.71	29 Cu 63.54	30 Zn 63.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.80
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc 98	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.4	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.6	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.90	56 Ba 137.34	57 La 138.91	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po 209	85 At 210	86 Rn 222
87 Fr 223	88 Ra 226	89 Ac 227															
			58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm 147	62 Sm 150.35	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.94	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97	
			90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np 237	94 Pu 242	95 Am 243	96 Cm 247	97 Bk 247	98 Cf 251	99 Es 254	100 Fm 253	101 Md 256	102 No 254	103 Lw 257	



Relazione tra il Riempimento degli Orbitali e la Tabella Periodica





Domande sulla Configurazione Elettronica

- Configurazione elettronica – cos'è e come si scrive lo stato fondamentale di un atomo?
- Come si individuano le anomalie (atomi che non seguono le regole normali)?
- Perché non sono particolarmente sorprendenti le anomalie per l'ordine energetico degli orbitali di Hartree?
- Che informazioni si possono dedurre dalla configurazione elettronica?
- **Problema** Quale è la configurazione elettronica dell'atomo di fosforo, $Z = 15$?
- **Soluzione:** Il numero di elettroni occupanti gli orbitali a minor energia sono:
1s: 2 elettroni, 2s: 2 elettroni; 2p: 6 elettroni, 3s: 2 elettroni. Sono così sistemati 12 elettroni. I tre elettroni rimanenti vanno nell'orbitale 3p, per cui la configurazione completa del P è $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$.



1. Perché gli elettroni interni non sono direttamente implicati nella chimica normale?
2. Cosa determina il raggio di un atomo e dello ione formato a partire da quell'atomo?
3. Spostandosi lungo il secondo periodo della tabella periodica, perché l'energia di prima ionizzazione del B è inferiore a quella del Be? Date una spiegazione che includa le variazioni sia della struttura nucleare che di quella elettronica nel passare da B a Be!
4. Scrivere la reazione che illustra il concetto di affinità elettronica per Cl e un'altra per Na?
5. Scrivere la configurazione elettronica per Na^+ e Cl^- e spiegare perché il potenziale di ionizzazione di Cl è superiore a quello di Na.



- Perché gli elettroni in un atomo di He non possono essere tutti appaiati?
- Perché gli elettroni in un atomo di N non possono essere tutti appaiati?
- Gli elettroni in un atomo di O sono tutti appaiati o spaiati?
- Come si può misurare l'appaiamento o la sua assenza?
- Se alcuni elettroni in un atomo fossero spaiati, che cosa si evidenzerebbe conducendo un esperimento in un campo magnetico?
- Cosa si dovrebbe rilevare dal fatto che gli elettroni in un atomo siano tutti appaiati?
- Quando si riempie un diagramma energetico di orbitali risultante da un modello, qual è la normale sequenza di riempimento?
- Come si può dimostrare ciò con un magnete se tutti gli atomi in un campione solido sono diamagnetici oppure se alcuni atomi sono paramagnetici?