



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



### LA STRUTTURA DELL'ATOMO

#### 4.A PRE-REQUISITI

#### 4.B PRE-TEST

#### 4.C OBIETTIVI



#### 4.1 UNO SGUARDO ALLA STORIA

#### 4.2 L'ATOMO DI BOHR (1913)



#### 4.3 L'ORBITALE



#### 4.4 NUMERI QUANTICI E FORME DEGLI ORBITALI



#### 4.5 CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEGLI ATOMI POLIELETTRONICI



#### 4.5.1 ORDINE E RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI E PRINCIPIO DI PAULI



#### 4.5.2 PRINCIPIO DELLA MASSIMA MOLTEPLICITA' (REGOLA DI HUND)

#### 4.5.3 ESERCIZI SVOLTI

#### 4.6 ENERGIE DI IONIZZAZIONE E DISTRIBUZIONE DEGLI ELETTRONI

#### 4.V VERIFICA SE HAI CAPITO

#### ESERCIZI



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



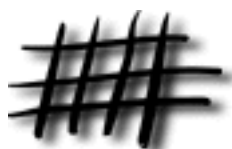
### 4.A PRE-REQUISITI

### 4.C OBIETTIVI



Prima di iniziare a lavorare su questa Unità, dovresti essere in grado di:

- comprendere i concetti di atomo, molecola, ione ed elemento;
- interpretare alcuni fenomeni sul piano microscopico e su quello macroscopico;
- sapere cosa si intende per unità strutturale e conoscere i diversi tipi di unità strutturali corrispondenti alle sostanze semplici e composte;
- avere una certa familiarità con i simboli che si usano per rappresentare gli elementi chimici.



### 4.B PRE-TEST

Costruisci la configurazione elettronica dell'elemento sodio e scrivi la sua reazione di prima ionizzazione.

[Soluzione](#)

Al termine di questa Unità dovrai essere in grado di:

- conoscere le caratteristiche essenziali delle tre particelle fondamentali che costituiscono l'atomo;
- definire il numero atomico ed il numero di massa;
- spiegare cosa sono gli isotopi e comprendere la simbologia che li rappresenta;
- ripercorrere l'evoluzione storica dei modelli atomici con particolare attenzione a quello oggi accettato;
- comprendere in modo descrittivo (non-matematico) il concetto di orbitale e le caratteristiche fondamentali dei diversi tipi di orbitali;
- conoscere il significato dei vari numeri quantici;
- ricavare la struttura elettronica di un qualsiasi elemento a partire dal numero atomico e dalle regole di riempimento degli orbitali;
- comprendere il significato dell'energia di ionizzazione in relazione alla configurazione elettronica e scrivere le equazioni di formazione degli ioni dagli atomi.



# LA STRUTTURA DELL'ATOMO



## 4.1 UNO SGUARDO ALLA STORIA



In riferimento alle sostanze, avevamo parlato di unità strutturali; in particolare:



- Una sostanza è costituita da unità strutturali di un unico tipo.
- Le unità strutturali possono essere atomi, molecole o ioni.
- Le unità strutturali delle sostanze semplici sono o atomi o molecole di un solo elemento.
- Le unità strutturali delle sostanze composte sono molecole formate da atomi di più elementi diversi.



Consideriamo ora la struttura della più semplice di queste unità strutturali, cioè l'atomo. Seguiremo inizialmente una prospettiva di tipo storico: verranno ripercorse le scoperte che hanno permesso di elaborare i vari modelli atomici e verranno sottolineati i concetti fondamentali che permettono di descrivere la struttura atomica.



1. ELETTRONI E PROTONI (Thomson, 1897)  
 Thomson aveva condotto esperimenti sulla conducibilità dei gas a bassa pressione, in seguito all'applicazione di una differenza di potenziale elevata. Applicando al tubo contenente il gas una ddp di 15000 volt, osservò sul vetro una luminescenza verde, dovuta a raggi che partivano dal catodo e proseguivano in linea retta, che Thomson chiamò "raggi catodici". Essi caricavano negativamente la lamina di un elettrometro ed applicando un campo elettrico venivano deviati verso il polo positivo, il che fece supporre che avessero carica negativa. Dopo ulteriori studi, Thomson concluse che i raggi erano costituiti da ELETTRONI, cioè da particelle cariche negativamente aventi massa molto piccola (dell'ordine di  $10^{-28}$  g, circa 1840 volte meno di un atomo di idrogeno). L'esperimento dava lo stesso risultato indipendentemente dai materiali usati, per cui gli elettroni erano probabilmente presenti in tutte le sostanze. L'elettrone rappresenta l'unità di carica negativa.



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



Thomson aveva osservato anche una luminosità rossa, deflessa dai campi elettrici e magnetici in direzione opposta rispetto agli elettroni; questi raggi avevano, quindi, presumibilmente carica positiva, richiedevano per essere deviati campi più forti e la loro massa dipendeva dal gas usato (ad esempio, usando l'idrogeno la loro massa era praticamente uguale a quella degli atomi di idrogeno). Thomson concluse che per collisione tra i raggi catodici, cioè gli elettroni, e gli atomi di gas si ottenevano ioni positivi in seguito alla perdita di elettroni.

La particella positiva relativa all'idrogeno ( $H^+$ ) rappresenta l'unità di carica positiva, ha una massa dell'ordine di  $10^{-24}$  g e fu chiamata PROTONE.

### 2. MODELLO ATOMICO di Thomson (1899)

Thomson, in base ai risultati ottenuti, ipotizzò che l'atomo fosse costituito da elettroni carichi negativamente immersi in una sfera carica positivamente e stabilizzati dal loro rapido moto. Thomson stabilì che l'atomo fosse neutro (le cariche positive e negative si bilanciavano) e che la

massa fosse dovuta essenzialmente agli elettroni (fatto poi smentito).

### 3. DISPOSIZIONE DELLE CARICHE DELL'ATOMO (Geiger e Marsden, 1909)

Geiger e Marsden, sotto la guida di Rutherford studiarono la struttura dell'atomo, inviando come proiettili particelle  $\alpha$  (cioè ioni  $He^{2+}$ ) prodotte da un elemento radioattivo su una sottile lamina metallica e valutando il percorso delle particelle su uno schermo fluorescente. La maggior parte delle particelle proseguiva senza deviazioni, alcune venivano deviate e una su 10000 veniva sorprendentemente respinta indietro. Fu ipotizzato che le particelle cariche positivamente venissero riflesse o deviate quando attraversavano zone a carica positiva; essendo deviate solo poche particelle, tali zone positive occupavano probabilmente una minima parte dell'atomo, prevalentemente costituito da spazio vuoto.



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



### 4. MODELLO ATOMICO DI RUTHERFORD (1911)

Rutherford ipotizzò l'esistenza di un nucleo centrale carico positivamente, in cui si concentrava praticamente tutta la massa dell'atomo, mentre gli elettroni occupavano un volume molto maggiore. In seguito ai suoi calcoli, il nucleo risultò essere circa 10 mila volte più piccolo rispetto all'atomo nel suo insieme.

Il modello di Rutherford si serve di un modello planetario e considera ogni atomo come un piccolo sistema solare, con gli elettroni che ruotano attorno al nucleo. L'attrazione elettrostatica tra gli elettroni ed il nucleo permetterebbe di spiegare la stabilità dell'atomo.



### 5. NUMERO ATOMICO (Moseley, 1913)

A partire dai risultati ottenuti si trovò che il numero di cariche positive nel nucleo corrispondeva al numero d'ordine dell'atomo nella tavola periodica (**numero atomico**, indicato con  $Z$ ); i valori calcolati vennero confermati sperimentalmente da Moseley. Il metodo da lui usato permise anche di

calcolare i valori del numero atomico di alcuni elementi non ancora noti, ma dei quali si ipotizzava l'esistenza in base alla struttura della **tavola periodica**.

### 6. NEUTRONI (Chadwick, 1932)

La massa atomica relativa dell'elio, che contiene due protoni, dovrebbe essere doppia di quella dell'idrogeno (1 protone), mentre è quattro volte. Chadwick identificò la causa di questo con la presenza nel nucleo di particelle non cariche, i NEUTRONI, di massa analoga a quella dei protoni. Come osservato sperimentalmente, e considerando trascurabile la massa degli elettroni, la massa dell'atomo di elio (2 protoni, 2 neutroni e 2 elettroni) risulta quindi quadrupla rispetto a quella dell'idrogeno (1 protone e 1 elettrone).

### 7. ISOTOPI (Soddy, 1913)

Esperimenti svolti con lo **SPETTROMETRO DI MASSA** mostrarono che atomi di uno stesso elemento potevano avere masse leggermente diverse. Essi vennero chiamati **ISOTOPI** e sono



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



caratterizzati tutti dallo stesso numero atomico (cioè lo stesso numero di protoni), ma da un diverso numero di neutroni nel nucleo. La somma dei protoni e dei neutroni è espressa dal numero di massa (A). Ad esempio, il Carbonio (6 protoni) può esistere in tre isotopi, caratterizzati rispettivamente da numero di massa 12, 13 e 14 (corrispondenti a 6, 7 e 8 neutroni). Nella simbologia normalmente usata, il numero di massa si scrive in alto a sinistra del simbolo chimico, il numero atomico in basso a sinistra.



Esempio  $^{12}_6\text{C}$

IN SINTESI:



**NUMERO ATOMICO** (Z): è la caratteristica più importante per definire l'*elemento*; esso esprime il numero dei protoni presenti nel nucleo (e quindi anche il numero di elettroni nell'atomo neutro), nonché la posizione dell'elemento nella tavola periodica.



**NUMERO DI MASSA** (A): esprime la somma dei neutroni e dei protoni presenti nel nucleo; isotopi

diversi sono caratterizzati dallo stesso numero atomico, ma da diverso numero di massa.

- Il nucleo dell'**ATOMO** è costituito da protoni e neutroni
- occupa un volume limitato dell'atomo
- in esso si concentra la quasi totalità della massa dell'atomo

### PARTICELLE SUBATOMICHE

Particella	Massa (rispetto a quella del protone)	Carica (rispetto a quella del protone)
Protone	1	+1
Neutrone	1	0
Elettrone	1/1840	-1



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



### 4.2 L'ATOMO DI BOHR (1913)

#### PREMESSE



- Il modello di Rutherford è in disaccordo con la teoria elettromagnetica classica, secondo cui gli elettroni dovrebbero irradiare radiazioni elettromagnetiche, perdere energia e cadere sul nucleo. Nella realtà, ciò non avviene.



- Quando ad un elemento si fornisce energia (ad esempio con una fiamma o applicando una differenza di potenziale), questo emette una radiazione caratterizzata da valori ben precisi di lunghezza d'onda. Con metodi opportuni è possibile ottenere lo spettro della sostanza, in cui compare una serie di righe caratteristiche che permettono di riconoscerla. Il fenomeno può essere messo in relazione con l'acquisto di energia da parte degli elettroni del campione, che tornano allo stato precedente emettendo, appunto, una radiazione. Per spiegare la formazione di questi spettri a righe si dovrebbe supporre che gli elettroni occupino soltanto alcuni livelli energetici e che la differenza tra



i livelli possa assumere soltanto determinati valori.

- Plank ipotizza che l'energia sia "quantizzata", cioè possa assumere soltanto alcuni valori specifici; anche la differenza tra due valori assumerebbe un valore ben preciso. Inoltre, l'energia è proporzionale alla radiazione emessa, attraverso la costante di Plank.

Studiando l'atomo di idrogeno, Bohr formulò un modello, i cui postulati possono essere così sintetizzati:

1. L'elettrone ruota attorno al nucleo percorrendo orbite circolari.
2. L'elettrone possiede una serie stabilita di orbite permesse, dette stati stazionari, in cui alcune proprietà dell'elettrone assumono valori costanti. Fino a quando un elettrone rimane su una di queste orbite, la sua energia resta costante e non si ha emissione, con conseguente perdita di energia.
3. Un elettrone può passare da un'orbita all'altra; in queste transizioni vengono coinvolte quantità fisse di energia, in accordo con la teoria di Plank.



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



Nel modello atomico dell'idrogeno calcolato in base a questi presupposti; gli stati permessi vengono indicati da un numero detto **NUMERO**



**QUANTICO** ( $n$ ) che può assumere valori interi come  $n=1$ ,  $n=2$ , ecc. Il livello ad energia inferiore viene definito stato FONDAMENTALE, mentre i livelli successivi rappresentano eventuali stati ECCITATI ed hanno energia più elevata rispetto allo stato fondamentale. Un elettrone che si trova sul livello corrispondente ad  $n = 1$  potrà passare ad un livello eccitato se gli viene fornita energia; l'elettrone tenderà a tornare allo stato fondamentale emettendo una radiazione di frequenza caratteristica, cui abbiamo accennato parlando degli spettri di emissione.



Il modello permette, inoltre, di calcolare i raggi delle orbite permesse in un atomo di idrogeno e le loro energie; ad esempio, lo stato fondamentale ( $n = 1$ ) ha un raggio di 0,053 nm.



Il modello di Bohr mostrò i suoi limiti quando si cercò di applicarlo ad atomi più complessi rispetto all'idrogeno; negli spettri di questi atomi

comparivano serie di righe molto vicine tra di loro, dette multipletti, difficilmente spiegabili con il modello di Bohr.

Sommerfeld (1915) ipotizzò che le orbite non fossero circolari, ma ellittiche e costruì un sistema quantizzato simile a quello di Bohr, introducendo accanto ad  $n$ , un nuovo numero quantico ( $l$ ) che determinava l'eccentricità delle orbite, e quindi la forma dell'ellisse, ed il cui valore era legato a quello di  $n$ . All'interno di ogni livello (legato ad un certo valore di  $n$ ) erano quindi presenti vari sottolivelli, corrispondenti ai possibili valori assunti da  $l$ .

Anche questo ulteriore contributo non riusciva, tuttavia a spiegare tutti i fenomeni osservati e furono necessari ulteriori apporti ed un netto cambiamento di impostazione per definire il modello di atomo ancora oggi accettato.

### 4.3 L'ORBITALE

#### PREMESSE

1. De Broglie con la sua teoria ondulatoria propone di associare alle particelle, ed in particolare





## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



all'elettrone, un'onda elettromagnetica. Tale onda diventa rilevante e sperimentalmente determinabile soltanto per particelle caratterizzate da una massa molto piccola e da una velocità elevata. L'elettrone risulta, quindi, distribuito ("delocalizzato") in un'onda di probabilità, che può essere vista come una nuvola carica negativamente ed esprime la probabilità di trovare l'elettrone in una certa zona dello spazio.

2. Secondo il principio di indeterminazione di Heisemberg, non è possibile misurare simultaneamente e con accuratezza la posizione di un elettrone la sua quantità di moto. Effettuando la misura, verrebbe introdotta una perturbazione tale che la situazione precedente non sarebbe più determinabile, per cui diventa necessario ragionare in termini di probabilità.

Il modello ondulatorio individua zone dello spazio dove massima è la densità di carica negativa, e quindi la probabilità di trovare l'elettrone. Poiché i *legami chimici* possono essere visti in termini di sovrapposizione tra zone ad alta densità elettronica

appartenenti ad atomi diversi, la conoscenza della forma e dell'orientamento di tali zone negli atomi permette di interpretare e prevedere le proprietà e struttura delle specie chimiche.

Ciò è possibile risolvendo l'equazione di Schrödinger, che rappresenta in tre dimensioni l'onda associata ad un elettrone; si ottengono una serie di valori, detti FUNZIONI D'ONDA (ed indicati con il simbolo  $\Psi$ ) che consentono di conoscere la distribuzione della densità elettronica nello spazio attorno al nucleo. Assegnando valori specifici ai numeri quantici si ottengono particolari funzioni d'onda, dette *ORBITALI*. Tra le infinite soluzioni possibili, sono accettabili quelle che:

- assumono un solo valore;
- sono continue e finite in ogni punto dello spazio ed all'infinito tendono a 0;
- sono tali per cui  $\iiint \Psi^2 dv = 1$ , dove  $\Psi^2$  rappresenta l'intensità dell'onda associata all'elettrone; l'integrale esprime la probabilità di trovare l'elettrone nel volume infinitesimo  $dv$ , ed il fatto che tale integrale esteso a tutto lo spazio valga 1, significa che in esso si troverà certamente l'elettrone.



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



L'orbitale rappresenta, quindi, una regione caratterizzata da un'alta densità elettronica in cui è massima la probabilità di trovare l'elettrone, e corrisponde idealmente alle orbite che caratterizzavano i modelli precedenti. Gli orbitali, così come le orbite, sono associati a diversi numeri quantici ed i due modelli risultano in definitiva abbastanza simili. Tuttavia, si tratta di una coincidenza formale cui corrispondono presupposti profondamente differenti: mentre nella teoria quantistica ad ogni numero quantico era associata una realtà fisica (un'orbita circolare o ellittica), nella teoria ondulatoria i numeri quantici compaiono come coefficienti nell'equazione che descrive l'elettrone.

Ad esempio, nell'atomo di Bohr l'orbita corrispondente allo stato fondamentale si trovava ad una distanza di 0,053 nm dal nucleo. Nel modello ondulatorio, l'elettrone non è più identificabile con una particella che percorre una traiettoria, quindi non si parla più di distanza dell'elettrone dal nucleo, quanto piuttosto di probabilità che l'elettrone si trovi ad una certa distanza dal nucleo. In questo caso i

calcoli indicano che per lo stato fondamentale dell'atomo di H il valore massimo di probabilità si ha a 0,053 nm dal nucleo. Il risultato coincidente si accompagna, tuttavia, ad una netta differenza concettuale: in un caso si afferma che l'elettrone si trova a 0,053 nm dal nucleo, nell'altro che 0,053 nm è la distanza alla quale è massima la probabilità di trovare l'elettrone, delocalizzato sull'orbitale.

Gli orbitali possono essere rappresentati graficamente con superfici che rappresentano la "nube" di densità elettronica e che convenzionalmente comprendono il 99 % di probabilità che l'elettrone si trovi al loro interno.

### 4.4 NUMERI QUANTICI E FORME DEGLI ORBITALI

I diversi tipi di orbitali si ottengono combinando in vario modo i **NUMERI QUANTICI**. Vediamoli uno per uno, indicando qualche caratteristica.

1. Numero quantico PRINCIPALE ( $n$ ): può assumere valori positivi interi (1, 2, 3, ...), indica il



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



livello in cui si colloca l'elettrone, e quindi è in relazione con le dimensioni e l'energia dell'orbitale.



2. Numero quantico ANGOLARE (o secondario,  $l$ ): può assumere valori interi positivi da 0 a  $n-1$  ( $n$  è il numero quantico principale) ed indica la forma geometrica dell'orbitale.



3. Numero quantico MAGNETICO ( $m$ ): può assumere ogni valore intero, zero incluso, compreso tra  $+l$  e  $-l$  ( $l$  è il numero quantico angolare) e può essere messo in relazione con l'orientamento dell'orbitale nello spazio.



A questi numeri quantici caratteristici della meccanica ondulatoria, nel 1925 ne venne aggiunto un quarto per giustificare alcuni aspetti dello spettro dell'idrogeno, altrimenti inspiegabili.



4. Numero quantico di SPIN ( $m_s$ ): esprime il senso di rotazione dell'elettrone attorno al proprio asse e può assumere i valori di  $1/2$  e  $-1/2$ , indicati convenzionalmente con  $\uparrow$  e con  $\downarrow$ , come verrà mostrato nei successivi esempi di riempimento degli orbitali.



Un elettrone viene quindi descritto in modo univoco dai quattro numeri quantici.

Il ***PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI*** esclude che in un atomo o una molecola possano coesistere due o più elettroni caratterizzati dai quattro numeri quantici uguali (al limite, due elettroni che occupano lo stesso orbitale avranno uguali i primi tre, ma quello di spin opposto).

I livelli elettronici vengono numerati secondo valori crescenti di  $n$ ; al crescere di  $n$ , aumentano l'energia dell'elettrone e, in genere, la sua distanza dal nucleo. Consideriamo ora le varie possibilità, ricavando per ogni valore del numero quantico principale ( $n$ ) i corrispondenti sottolivelli determinati dai valori dei numeri quantici angolare ( $l$ ) e magnetico ( $m$ ), sintetizzando le principali caratteristiche dei diversi tipi di orbitali.

Per  $n = 1$  si ha  $l = 0$ ; l'unico orbitale di questo livello è un ORBITALE S, a simmetria sferica centrata nel nucleo. Tutti gli orbitali caratterizzati da  $l = 0$  sono orbitali s, e, a seconda del livello, si parlerà di orbitali 1s, 2s, ecc. Poiché a  $l = 0$



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



corrisponde  $m = 0$ , esiste un solo orbitale di tipo s per livello.



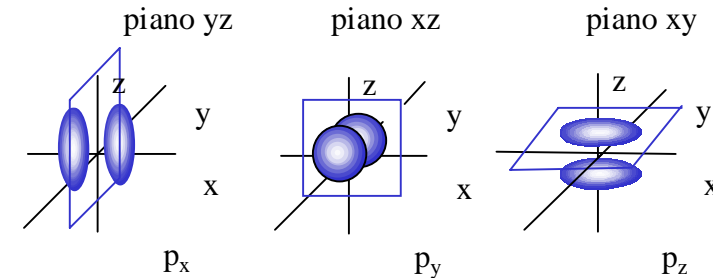
Orbitale s



Per  $n = 2$ , si può avere  $l = 0$  (orbitale 2s, già citato) e  $l = 1$ : in questo caso si ha un ORBITALE P, caratterizzato da una distribuzione di probabilità a forma di doppio lobo; i due lobi sono separati da un piano a probabilità nulla, detto piano nodale. Per  $l = 1$ ,  $m$  può assumere tre valori (-1, 0, +1): gli orbitali p sono a gruppi di 3, orientati ortogonalmente uno rispetto all'altro secondo i tre assi (x, y z), solitamente indicati con  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$ . Vengono spesso rappresentati separatamente, ma andrebbero immaginati riuniti in un'unica terna di assi, alla cui origine è posto il nucleo. I tre orbitali p relativi ad un



certo valore di  $n$  hanno lo stesso valore di energia o, come si dice, sono degeneri.



Orbitale p

Nei livelli successivi si hanno altri tipi di orbitali: per  $l = 2$  si hanno gli ORBITALI D (5 orbitali degeneri), mentre per  $l = 3$  abbiamo gli ORBITALI F (7 orbitali degeneri); in entrambi i casi la geometria della distribuzione di probabilità è più complessa rispetto ai casi precedenti.

Poiché il **Principio di Pauli** esclude che in uno stesso atomo o molecola possano esistere due elettroni caratterizzati dagli stessi quattro numeri



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



quantici, ne consegue che

un orbitale può essere occupato da un massimo di due elettroni



(che differiscono per il valore del numero quantico di spin); inoltre, per i vari livelli si hanno:



$n = 1 \rightarrow 1$  orbitale (o sottolivello)

$n = 2 \rightarrow 4$  orbitali

$n = 3 \rightarrow 9$  orbitali

in generale  $\rightarrow n^2$  orbitali



Poiché ogni orbitale può contenere 2 elettroni, il numero massimo di elettroni che può essere contenuto in un livello con numero quantico principale  $n$  è dato da  $2n^2$  (ad esempio, 2 elettroni per  $n = 1$ , 8 elettroni per  $n = 2$ , e così via).



Riassumiamo le caratteristiche principali dei diversi tipi di orbitale.



orbitale	l	m	n° orbitali degeneri	n° max elettroni
s	0	0	1	2
p	1	-1, 0, +1	3	6
d	2	-2, -1, 0, +1, +2	5	10
f	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	14

### 4.5 CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEGLI ATOMI POLIELETTRONICI

La **CONFIGURAZIONE ELETTRONICA** di un atomo dà indicazioni su come gli elettroni sono distribuiti nei suoi orbitali; ad essa sono collegate le proprietà chimiche. Rispettando alcune semplici regole, la configurazione elettronica può essere costruita a partire dal numero atomico, secondo un procedimento relativamente semplice. Dopo alcune indicazioni teoriche, verranno presentati alcuni esempi.



# LA STRUTTURA DELL'ATOMO



## 4.5.1 ORDINE DI RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI E PRINCIPIO DI PAULI



La configurazione elettronica viene costruita secondo il principio dell'Aufbau (= edificare) disponendo gli elettroni negli orbitali secondo energia crescente, a partire da quelli ad energia minore. Si tiene conto degli orbitali degeneri (3 per gli orbitali p, 5 per i d, 7 per gli f) e del fatto che ogni orbitale può contenere al massimo due elettroni con spin opposti (principio di esclusione di Pauli). La somma degli elettroni disposti negli orbitali corrisponderà al numero atomico.



L'ordine di riempimento degli orbitali, verificato sperimentalmente in passato, può essere ricavato dallo schema seguente procedendo lungo le frecce. Si può notare che non sempre il principio del numero quantico principale crescente è rispettato: ad esempio, gli orbitali 3d hanno energia leggermente superiore rispetto al 4s e quest'ultimo viene occupato prima.

Ordine di riempimento degli orbitali negli atomi secondo il "principio di Aufbau".

	Valore di $l$			
	0	1	2	3
Valore di $n$				
1	← 1s			
2	← 2s	2p		
3	← 3s	3p	3d	
4	← 4s	4p	4d	4f
5	← 5s	5p	5d	5f
6	← 6s	6p	6d	
7	← 7s	← 7p		

## 4.5.2 PRINCIPIO DELLA MASSIMA MOLTEPLICITÀ (REGOLA DI HUND)

La regola di Hund (**PRINCIPIO DELLA MASSIMA MOLTEPLICITÀ**) afferma che, se più elettroni occupano orbitali degeneri, essi occupano il maggior numero possibile di orbitali singolarmente e con spin parallelo (condizione di minima energia, molto stabile); successivamente si



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



dispongono gli altri elettroni, che si accoppiano ai precedenti. Se, ad esempio, 3 elettroni occupano un orbitale p (schematizzabile come [ ] [ ] [ ]), questi saranno disposti  $[\uparrow][\uparrow][\uparrow]$  oppure  $[\downarrow][\downarrow][\downarrow]$  e non  $[\uparrow\downarrow][\uparrow][ ]$  o  $[\uparrow][\uparrow][\downarrow]$ ; così, se in un orbitale p devono essere disposti 4 elettroni, la disposizione corretta sarà  $[\uparrow\downarrow][\uparrow][\uparrow]$ .

### ESEMPI

H (Z = 1)

L'unico elettrone occupa l'orbitale 1s (quello in assoluto ad energia minore).

Possiamo indicare questa configurazione con due notazioni equivalenti:

$1s^1$  oppure  $1s [\uparrow]$

He (Z = 2)

Entrambi gli elettroni occupano l'orbitale 1s; il livello caratterizzato da  $n = 1$  è completo.

$1s^2$  oppure  $1s [\uparrow\downarrow]$

Li (Z = 3)

2 elettroni occupano l'orbitale 1s (che risulta completo), il terzo l'orbitale 2s.

$1s^2 2s^1$  oppure  $1s [\uparrow\downarrow] 2s [\uparrow]$

In alternativa, si può scrivere [He]  $2s^1$  (cioè, configurazione dell'He più ...).

C (Z = 6)

2 elettroni occupano l'orbitale 2p, disponendosi secondo il principio della massima molteplicità.

$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$  ( $2p_z$  è vuoto) oppure  $1s [\uparrow\downarrow] 2s [\uparrow\downarrow] 2p [\uparrow][\uparrow][ ]$ ;

In tutti questi esempi, per semplicità, nella seconda notazione gli orbitali sono stati posti orizzontalmente, anche se sarebbe più corretto disporli verticalmente per visualizzare l'energia crescente.



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO

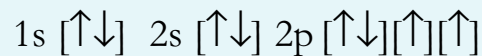


### 4.5.3 ESERCIZI SVOLTI

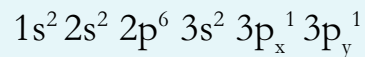
1) *Costruisci la configurazione elettronica dell'ossigeno (O, Z = 8)*



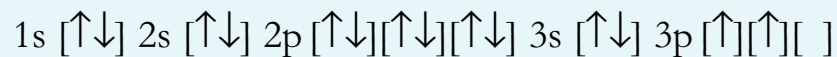
Nel riempimento dell'orbitale 2p è stato applicato il principio della massima molteplicità.



2) *Costruisci la configurazione elettronica del silicio (Si, Z = 14)*

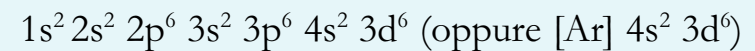


Può essere scritta anche [Ne] 3s<sup>2</sup> 3p<sup>2</sup> (il Ne ha configurazione 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup>, che corrisponde ai primi due livelli completi).

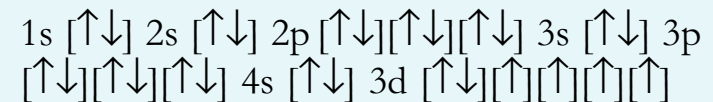


3) *Costruisci la configurazione elettronica del ferro (Fe, Z = 26)*

Gli orbitali 4s hanno energia inferiore ai 3d e vengono occupati prima:



Vediamo in dettaglio il riempimento dell'orbitale 3d:



### 4.6 ENERGIE DI IONIZZAZIONE E DISTRIBUZIONE DEGLI ELETTRONI

Fornendo energia, è possibile strappare un elettrone da un atomo, trasformandolo in ione; generalmente, per strappare elettroni successivi al primo sarà necessaria una quantità di energia più elevata, perché una specie carica positivamente esercita sugli elettroni, a carica negativa, un'attrazione maggiore rispetto ad una specie neutra. Ogni atomo sarà





## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



quindi caratterizzato da determinati valori dell'**ENERGIA DI IONIZZAZIONE**; poiché gli elettroni che si trovano sullo strato più esterno, ad energia più elevata e generalmente non completo, vengono strappati più facilmente, i valori delle successive energie di ionizzazione ci danno informazioni sulla configurazione elettronica.



Consideriamo, come primo esempio, il sodio:



Prima ionizzazione



Energia di ionizzazione = + 494 kJ mol<sup>-1</sup>



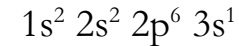
Seconda ionizzazione



Energia di ionizzazione = + 4564 kJ mol<sup>-1</sup>



Il valore molto maggiore dell'energia di seconda ionizzazione è perfettamente comprensibile se si osserva la configurazione elettronica del sodio (Z = 11), che è



L'elettrone nell'orbitale esterno 3s viene strappato molto più facilmente rispetto a quello nell'orbitale 2p, ad energia inferiore e più stabile.

Se consideriamo i valori delle energie di ionizzazione del berillio, che ha Z = 4 e configurazione elettronica 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup>, vediamo che i due elettroni che occupano l'orbitale 2s possono essere rimossi con una certa facilità, mentre gli altri due sono trattiene molto fortemente.

En. di prima ionizzazione 900 kJ mol<sup>-1</sup>

En. di seconda ionizzazione 1758 kJ mol<sup>-1</sup>

En. di terza ionizzazione 14905 kJ mol<sup>-1</sup>

En. di quarta ionizzazione 21060 kJ mol<sup>-1</sup>



## LA STRUTTURA DELL'ATOMO



### 4.V VERIFICA SE HAI CAPITO



4.V.1 Partendo dal significato degli *isotopi* e dalle definizioni di *numero atomico* e *numero di massa* e sapendo che per il carbonio  $Z = 6$ , individua il numero di protoni, elettroni e neutroni presenti:

- in un atomo di  $^{12}\text{C}$
- in un atomo di  $^{13}\text{C}$
- in un atomo di  $^{14}\text{C}$

- $[\downarrow][\uparrow][\uparrow]$
- $[\uparrow][\uparrow\downarrow][\uparrow]$
- $[\uparrow\downarrow][\uparrow][ ]$
- $[\uparrow\downarrow][\uparrow][\uparrow]$
- $[\uparrow\downarrow][ ][ ]$
- $[\uparrow\downarrow][\uparrow\downarrow][\uparrow]$



4.V.2 Costruisci la *configurazione elettronica* degli elementi seguenti, usando entrambe le notazioni viste:

- Ne ( $Z = 2$ )
- He ( $Z = 10$ )
- Ar ( $Z = 18$ )



4.V.3 In base al *principio della massima molteplicità*, individua tra le possibilità seguenti quelle corrette:





## *LA STRUTTURA DELL'ATOMO*



### Soluzione Pre- Test



Na (11)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$



$\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + e^-$

