

ATOMO

Democrito → IV secolo A.C.

Lavoisier → Legge della conservazione della massa

Proust → Legge delle proporzioni definite

Dalton → (1808) Teoria atomica

Gay-Lussac → Volumi di gas reagiscono secondo rapporti interi e semplici

Avogadro → Volumi uguali di gas contengono un ugual numero di MOLECOLE

Cannizzaro → Determinazione dei PESI MOLECOLARI da densità relative dei gas ($d_{\text{rel}} = d_{\text{A}}/d_{\text{B}} = M_{\text{A}}/M_{\text{B}}$) e poi dei → PESI ATOMICI

MOLECOLA →

INSIEME DI ATOMI TENUTI INSIEME DA LEGAMI CHIMICI

Es H_2O 2 atomi H + 1 atomo O

H_2SO_4 2 atomi H + 1 atomo S + 4 atomi O

PESO MOLECOLARE → SOMMA DEI PESI ATOMICI MOLTIPLICATI PER I RISPETTIVI COEFFICIENTI STECHIOMETRICI

$$\text{PM}_{\text{H}_2\text{O}} = 2 \times \text{PA}_{\text{H}} + \text{PA}_{\text{O}} = 2 \times 1 + 16 = 18 \text{ u.m.a.}$$

$$\text{PM}_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 2 \times \text{PA}_{\text{H}} + \text{PA}_{\text{S}} + 4 \times \text{PA}_{\text{O}} = 2 \times 1 + 32 + 4 \times 16 = 98 \text{ u.m.a.}$$

MOLE

PESO IN GRAMMI PARI A:

a) GRAMMOATOMO

IL PESO ATOMICO DELL'ELEMENTO

b) GRAMMOMOLECOLA

IL PESO MOLECOLARE DEL COMPOSTO

Una mole contiene un numero di particelle (atomi o molecole) pari al

NUMERO DI AVOGADRO

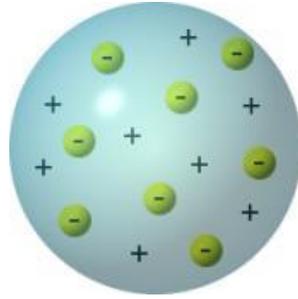
$$\underline{N = 6,022 \times 10^{23}}$$

Esempio: 1 mole di acqua (H_2O) pesa 18 g; quante moli ci sono in un litro di acqua?

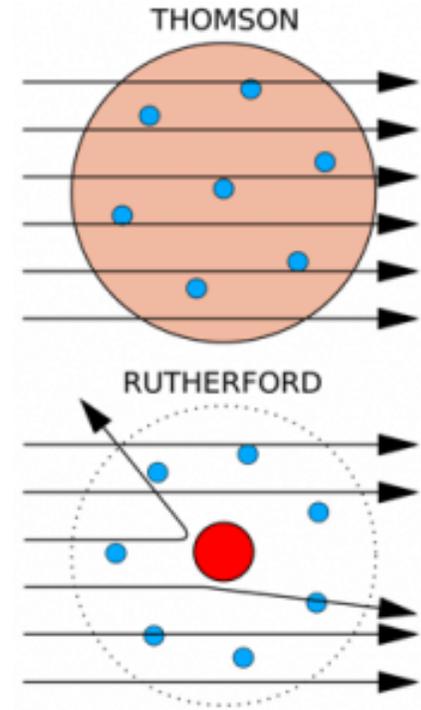
$$1 \text{ litro} \rightarrow 1 \text{ Kg} = 1000 \text{ g} \quad n = g/\text{PM} = 1000/18 = 55,5 \text{ moli} \quad g = n \times \text{PM}$$

Modelli atomici

Atomo: elettroni
protoni
neutroni

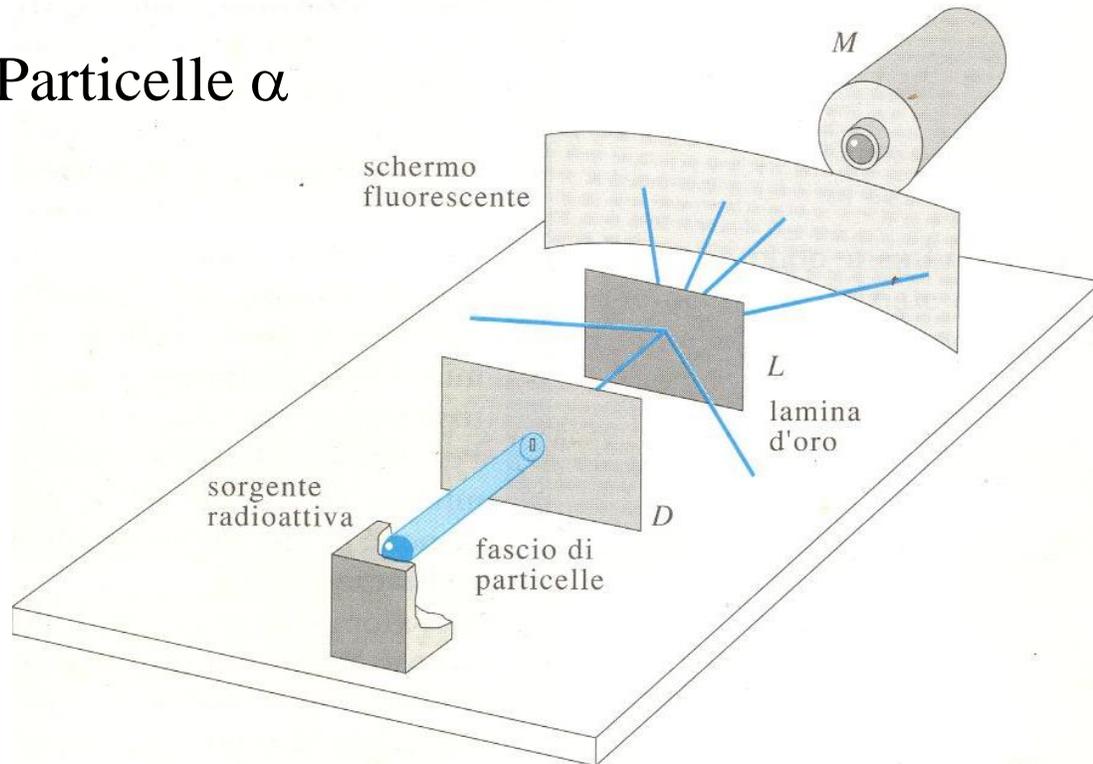


atomo di Thomson

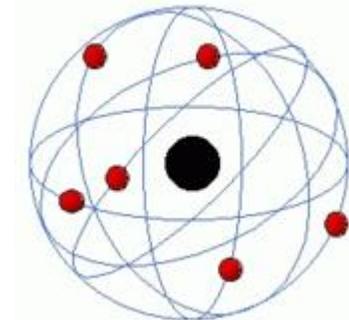
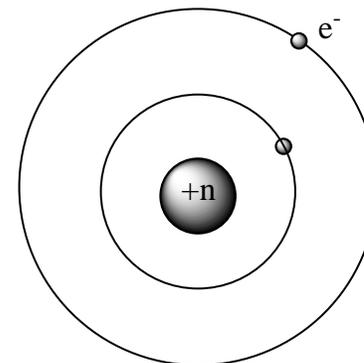


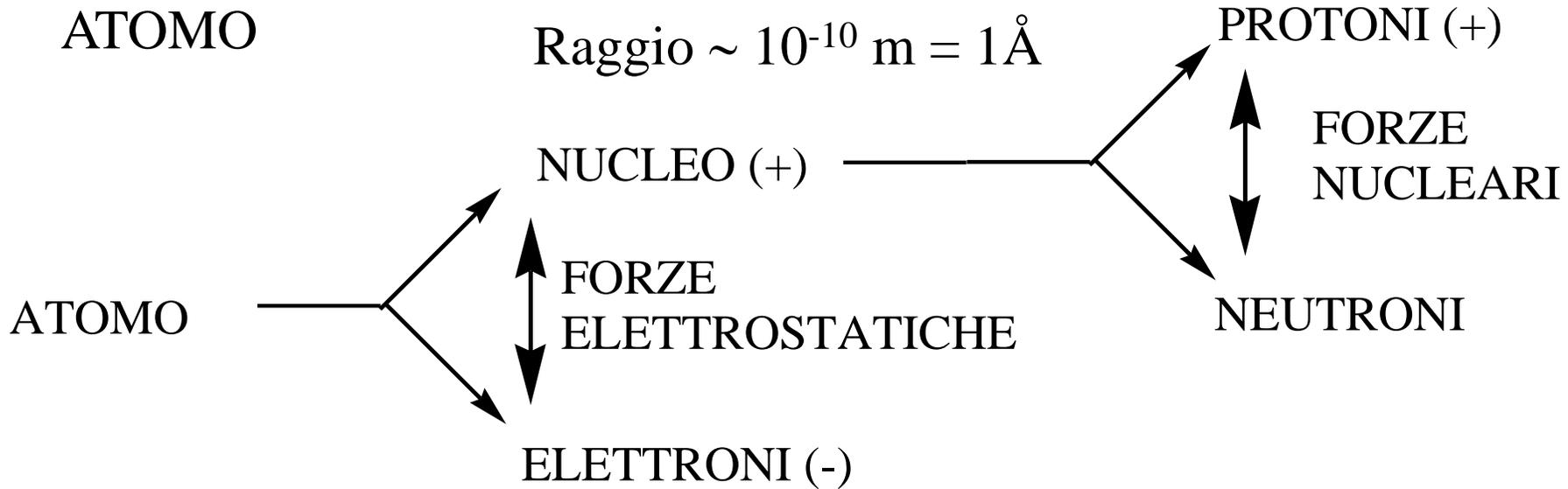
Esperimento di Rutherford

Particelle α



atomo di Rutherford



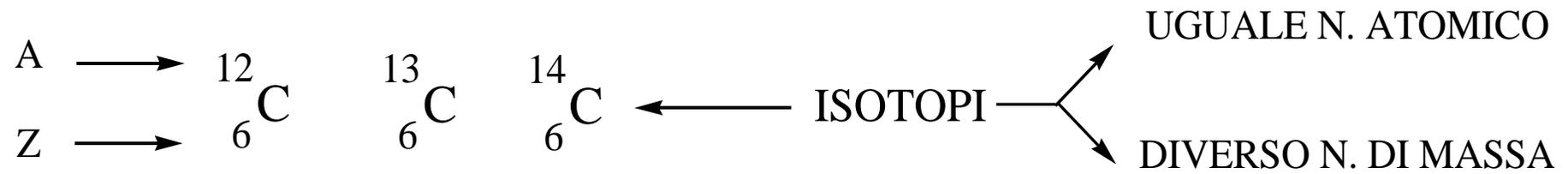


	CARICA	MASSA (kg)
PROTONE	$+1,6 \times 10^{-19} \text{ C (+e)}$	$1,673 \times 10^{-27}$
NEUTRONE	0	$1,673 \times 10^{-27}$
ELETTRONE	$-1,6 \times 10^{-19} \text{ C (-e)}$	$9,11 \times 10^{-31}$

N. ELETTRONI = N. PROTONI

N. PROTONI \rightarrow N. ATOMICO (Z)

N. PROTONI + N. NEUTRONI \rightarrow N. DI MASSA (A)



	${}^{16}\text{O}$	${}^{17}\text{O}$	${}^{18}\text{O}$
	% 99,762	0,038	0,20
abbondanza	0,99762	0,00038	0,0020
isotopica relativa			

UNITA' DI MASSA ATOMICA = 1/12 DELLA MASSA DI ${}^{12}\text{C}$

$$\text{PESO ATOMICO} = \frac{\text{MASSA DELL' ATOMO}}{1/12 \text{ DELLA MASSA DI } {}^{12}\text{C}}$$

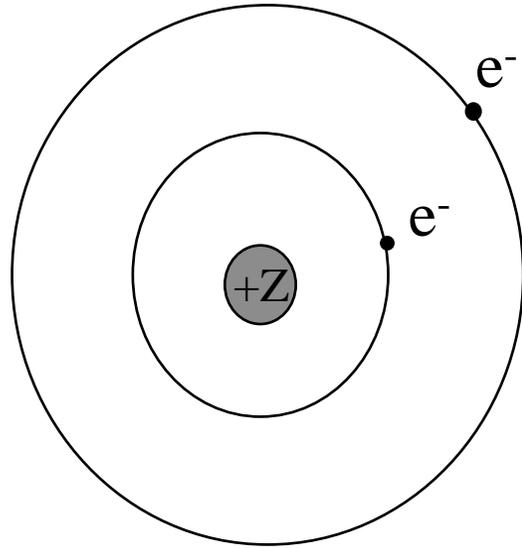
MISCELA ISOTOPICA

PESO ATOMICO di un elemento = $\sum_i x_i m_i$

x_i = abbondanza isotopica relativa

m_i = massa dell'isotopo

Modelli atomici



Atomo di Rutherford (modello planetario)
Gli elettroni si muovono intorno al nucleo
secondo orbite circolari

Problema: per le leggi della fisica questo sistema è instabile!
L'elettrone dovrebbe emettere energia sotto forma di radiazione
elettromagnetica e ricadere sul nucleo in 10^{-11} s

Atomo di Bohr:

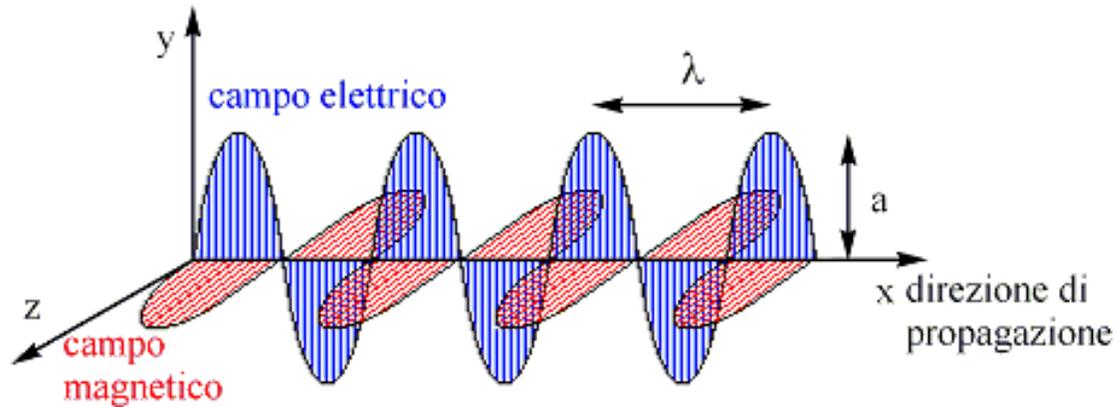
L'energia dell'elettrone è QUANTIZZATA

Non può variare con continuità

ma solo assumere alcuni valori

Planck → radiazione di corpo nero → quanti

RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA: Campo elettromagnetico oscillante che si propaga alla velocità della luce $c = 3,0 \times 10^8$ m/s nel vuoto

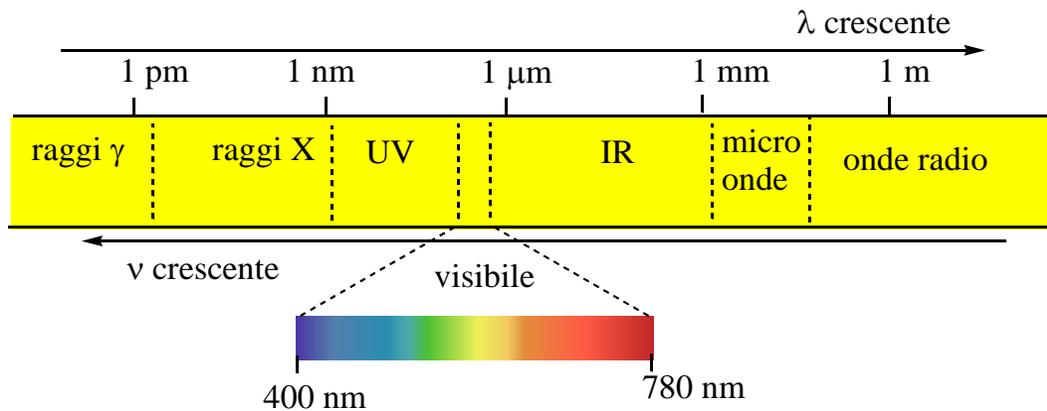


λ = lunghezza d'onda

ν = frequenza (Hz)

$\tilde{\nu}$ = numero d'onda (cm^{-1})

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$



RADIAZIONE
ELETTROMAGNETICA

ONDA

CORPUSCOLO
= FOTONE

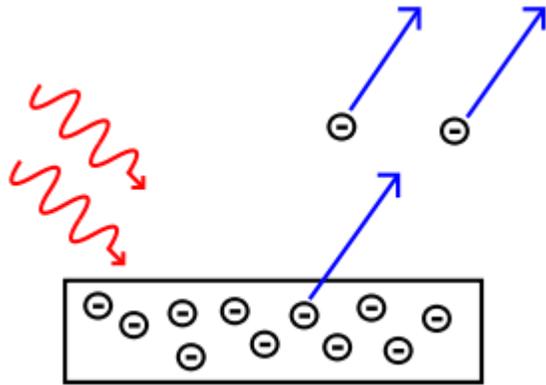
$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = h\frac{c}{\lambda}$$

Emissione di corpo nero (Max Planck)

$E=h\nu$ quantizzazione dell'energia

$h=6,626 \cdot 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$ Costante di Planck

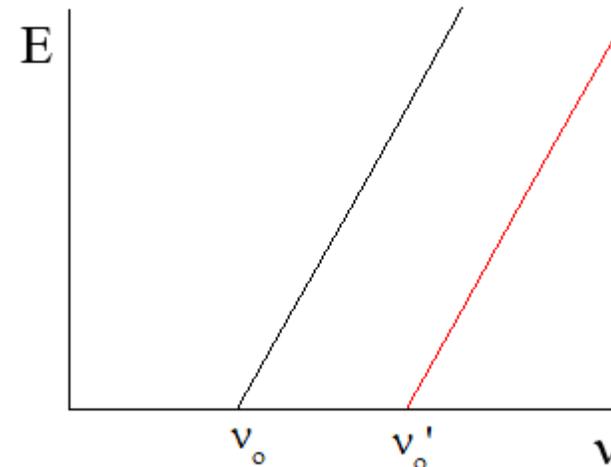
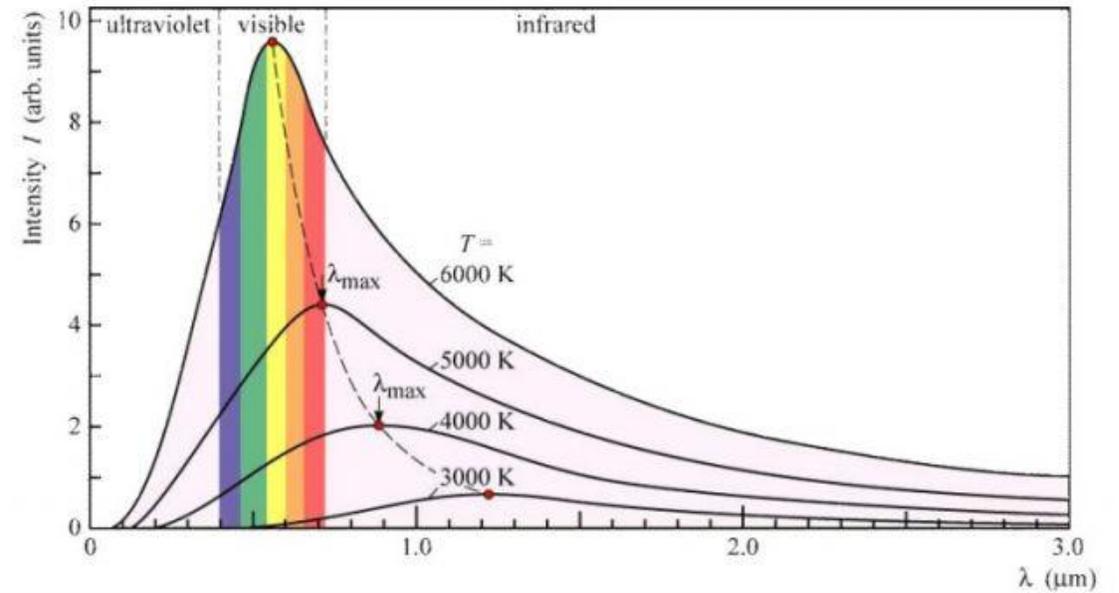
- Effetto fotoelettrico (Einstein)



$$E_{\text{fotone}} = h\nu$$

$$W = h\nu_0$$

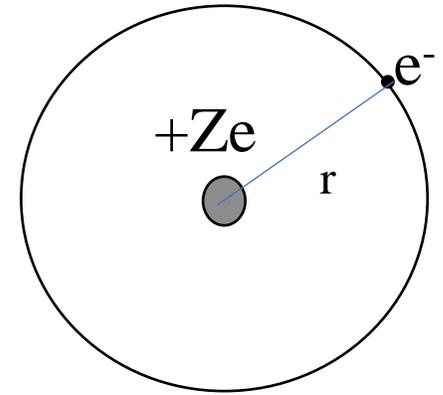
$$KE = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W = h(\nu - \nu_0)$$



Atomo di Bohr

ATOMO di IDROGENO e ATOMI IDROGENOIDI

$$\text{f. centrifuga} \rightarrow \frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \leftarrow \text{Coulomb} \quad \Leftrightarrow \quad mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



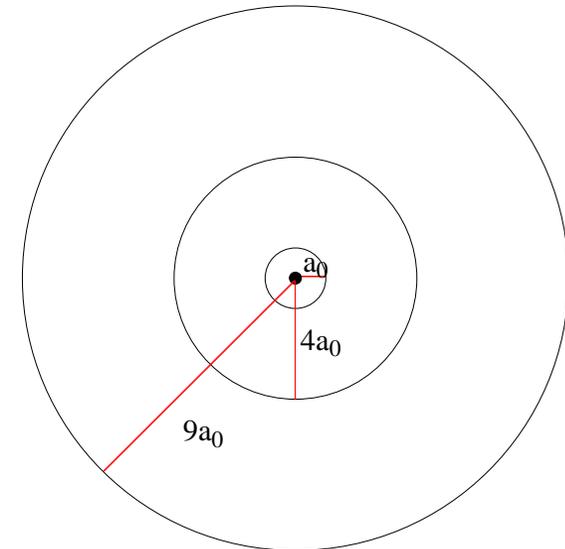
Quantizzazione del momento angolare

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \quad n = 1, 2, 3, \dots \dots \text{numero quantico}$$

$h = \text{costante di Planck} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

$$m^2 v^2 r^2 = \left(\frac{nh}{2\pi} \right)^2 \quad mv^2 = \left(\frac{nh}{2\pi r} \right)^2 \frac{1}{m} = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m r^2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m Z e^2} = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 0,529 \text{ \AA}$$



quantizzazione del raggio atomico

raggio di Bohr

$$Z=1 \quad r_n = n^2 a_0 \quad r = a_0, 4a_0, 9a_0, 16a_0, \dots$$

Energia= cinetica + potenziale

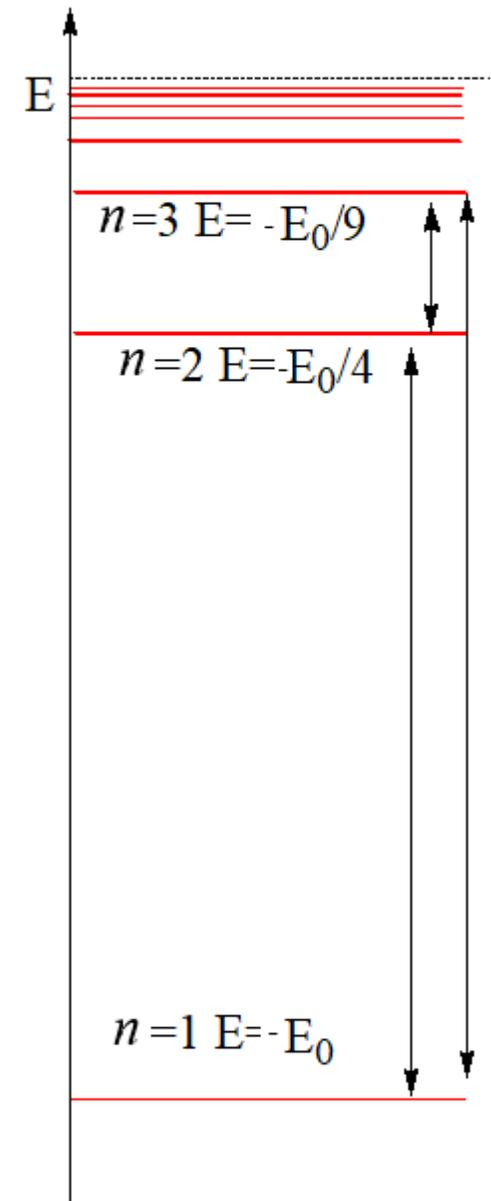
quantizzazione dell'energia

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2} = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$
$$mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m Z e^2} \quad E_0 = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

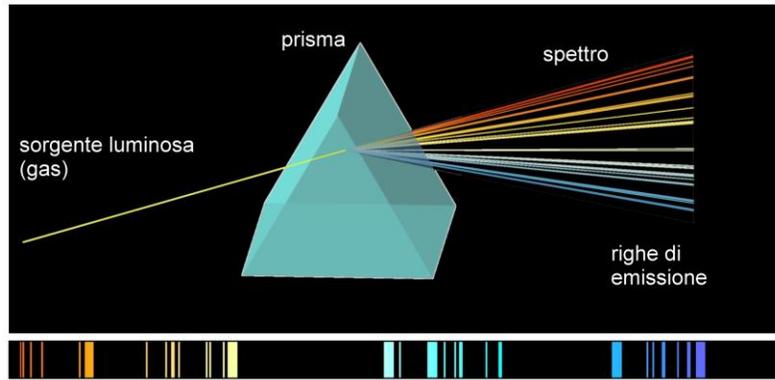
$$Z=1 \quad E_n = -E_0, -E_0/4, -E_0/9, -E_0/16 \dots$$

$n=1$ stato fondamentale $n > 1$ stati eccitati

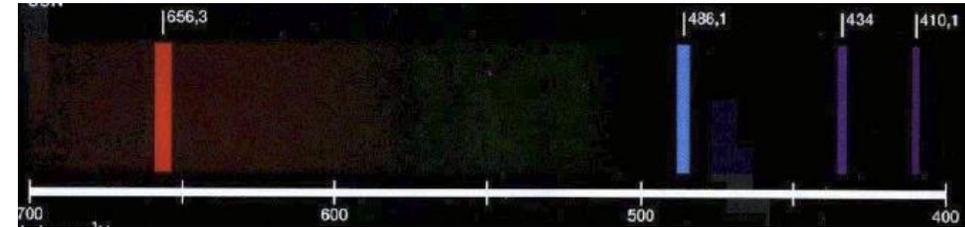
$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = E_0 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$



SPETTRI DI EMISSIONE ATOMICI (SPETTRI A RIGHE)



SPETTRO DELL'IDROGENO



$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

n_1, n_2 numeri interi e semplici

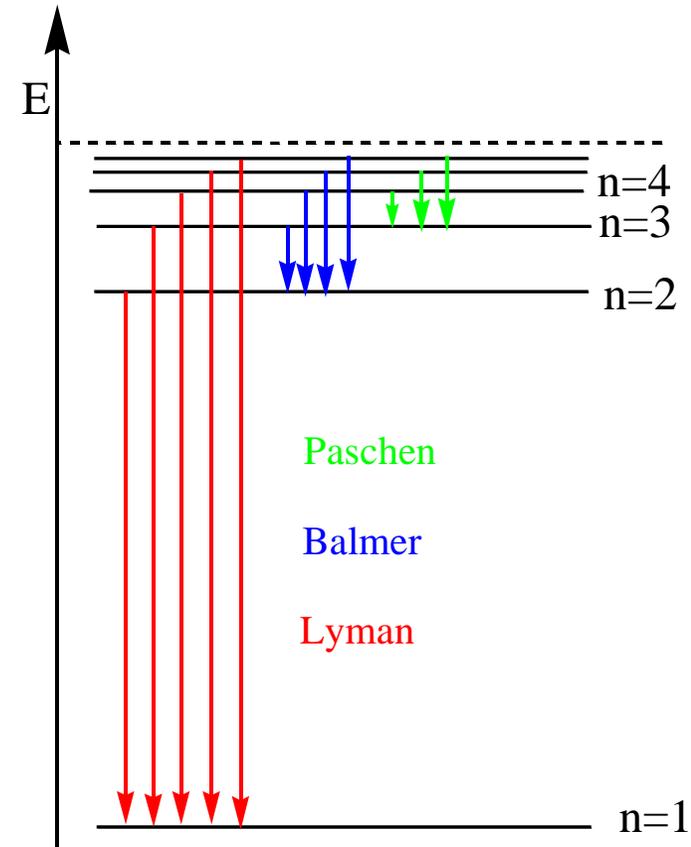
$$R_H = 1,09677 \text{ m}^{-1}$$

$$\Delta E = hc\tilde{\nu} = -E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

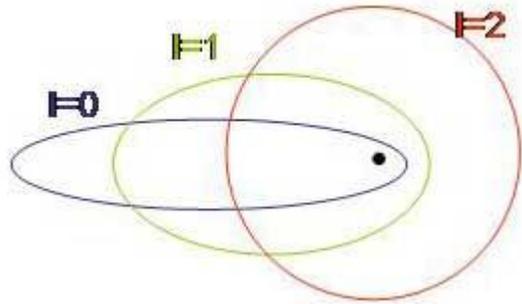
$n_1 = 1$ serie di Lyman (UV)

$n_1 = 2$ serie di Balmer (visibile)

$n_1 = 3$ serie di Paschen (IR)



Atomi Polielettronici



Principale
Secondario

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

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

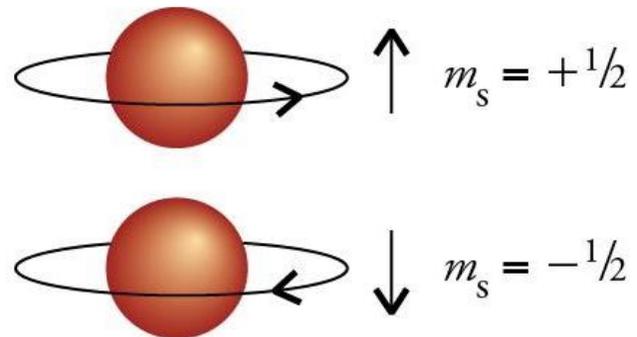
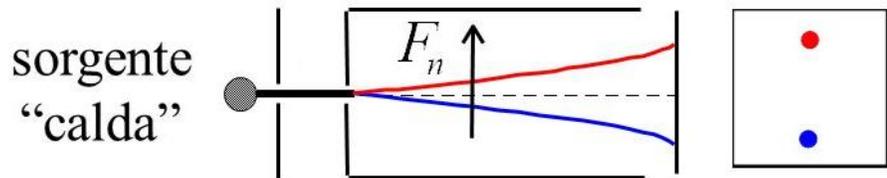
n valori di l

Magnetico

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

$2l+1$ valori di m

Esperimento di Stern e Gerlach

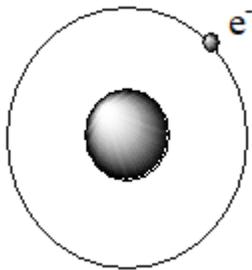
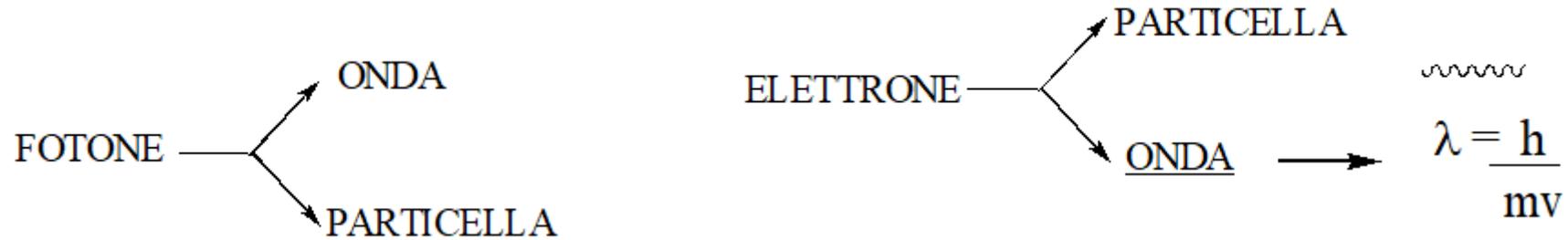


spin

MECCANICA QUANTISTICA

DE BROGLIE →

DUPLICE NATURA (CORPUSCOLARE e ONDULATORIA) della MATERIA



$$n\lambda = 2\pi r$$

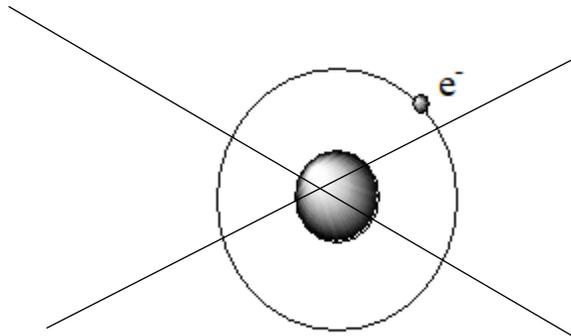
$$n\left(\frac{h}{mv}\right) = 2\pi r$$

$$mvr = \frac{nh}{2\pi}$$

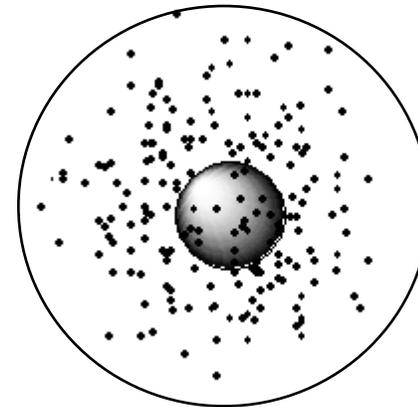
HEISENBERG → PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE

Non è possibile conoscere contemporaneamente posizione e quantità di moto dell'elettrone

$$\Delta(mv)\Delta x \geq \frac{h}{4\pi} \Rightarrow \Delta v\Delta x \geq \frac{h}{4\pi m}$$



Meccanica CLASSICA → ORBITA
Meccanica QUANTISTICA → ORBITALE



FUNZIONE D'ONDA

FUNZIONI D'ONDA

$$\Psi = \Psi(x,y,z)$$

Funzione matematica che descrive il comportamento dell'elettrone.

Si ottiene risolvendo l'equazione di Schroedinger

funzione d'onda $\Psi \rightarrow$ ENERGIA

DENSITA' DI PROBABILITA' $|\Psi|^2$

$|\Psi|^2 dV$ probabilità di trovare l'elettrone nell'elemento di volume dV

ATOMO DI IDROGENO \rightarrow FUNZIONI D'ONDA ORBITALI

$$\Psi(x,y,z) = \Psi_{n,l,m} \quad n, l, m \text{ numeri quantici}$$

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

Secondario $l = 0, \dots, n-1$ n valori di l

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

$n \rightarrow$ determina l'energia degli orbitali $E_n = - E_0/n^2$

$l, m \rightarrow$ determinano la forma e l'orientamento degli orbitali

l	0	1	2	3
	s	p	d	f

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

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

$m = -l \dots 0 \dots l$

n valori di l

$2l+1$ valori di m

n^2 orbitali

n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$	Orbitale	N°	tot	E_n
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s	1	1	$-E_0$
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s	1	4	$-E_0/4$
	1	-1, 0, +1	$\Psi_{2,1,-1}; \Psi_{2,1,0}; \Psi_{2,1,1}$	2p	3		
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	3s	1	9	$-E_0/9$
	1	-1, 0, +1	$\Psi_{3,1,-1}; \Psi_{3,1,0}; \Psi_{3,1,1}$	3p	3		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	$\Psi_{3,2,-2}; \Psi_{3,2,-1}; \Psi_{3,2,0}; \Psi_{3,2,1}; \Psi_{3,2,2}$	3d	5		
4	0	0	$\Psi_{4,0,0}$	4s	1	16	$-E_0/16$
	1	-1, 0, +1	$\Psi_{4,1,-1}; \Psi_{4,1,0}; \Psi_{4,1,1}$	4p	3		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	$\Psi_{4,2,-2}; \Psi_{4,2,-1}; \Psi_{4,2,0}; \Psi_{4,2,1}; \Psi_{4,2,2}$	4d	5		
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$\Psi_{4,3,-3}; \Psi_{4,3,-2}; \Psi_{4,3,-1}; \Psi_{4,3,0};$ $\Psi_{4,3,1}; \Psi_{4,3,2}; \Psi_{4,3,3}$	4f	7		

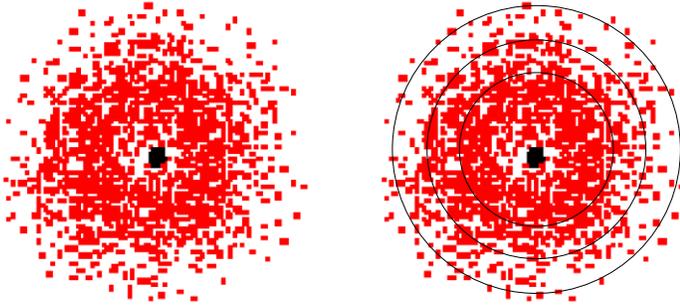
$$n=1, l=0$$

$$\Psi_{1,0,0} = \Psi_{1s}$$

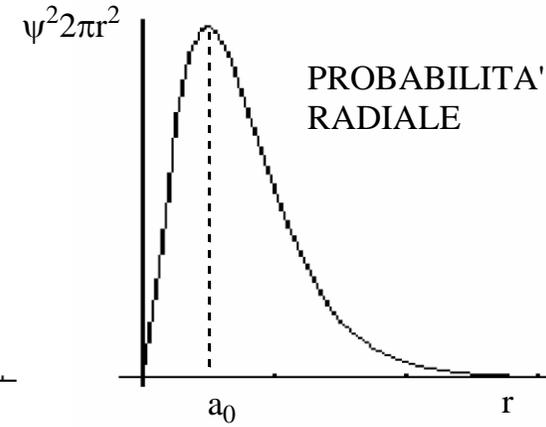
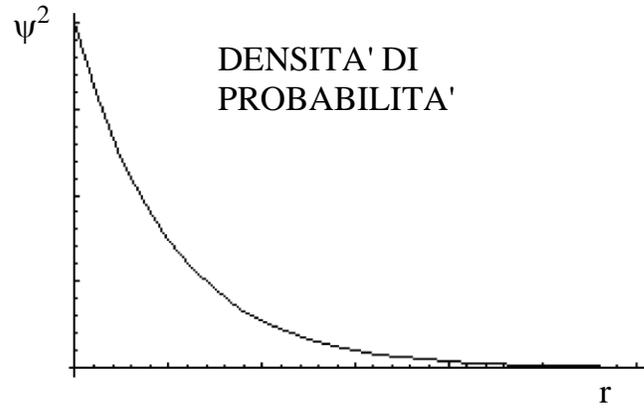
Orbitale 1s

$$\Psi_{1s} = N e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi_{1s}^2 = N^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

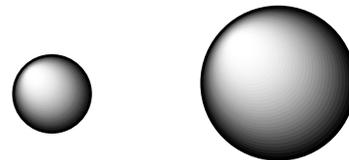


1s



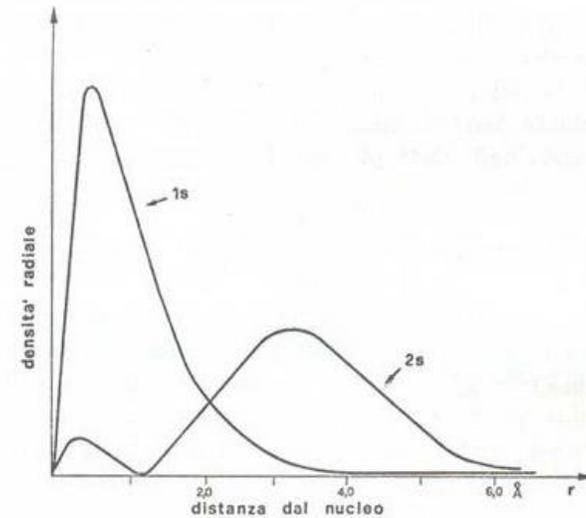
$$n=2, l=0$$

$$\Psi_{2,0,0} = \Psi_{2s}$$



1s

2s

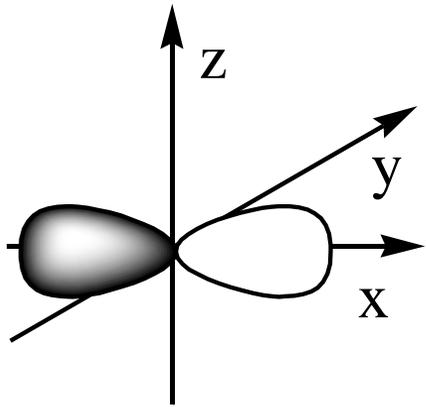


$n=2$ $l=0$ $m=0$ Ψ_{2s} 1

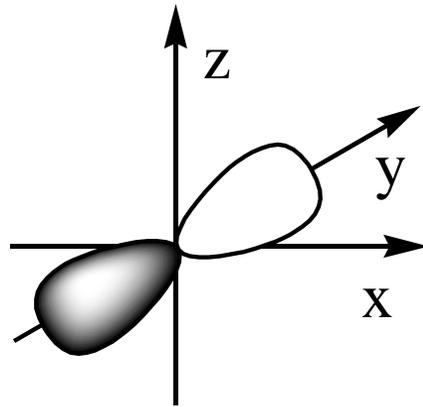
$n=2$ $l=1$ $m=0, \pm 1$ Ψ_{2p} $\Psi_{2,1,-1}; \Psi_{2,1,0}; \Psi_{2,1,1}$ 3

Ψ_{px} Ψ_{pz} Ψ_{py}

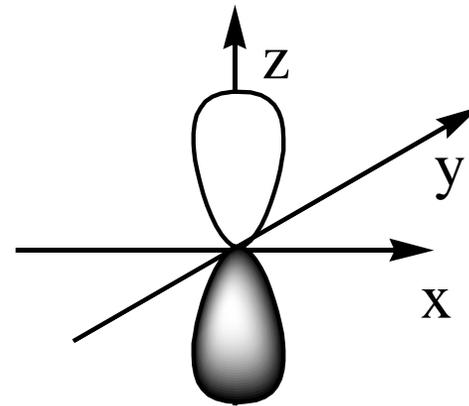
$$n^2 = 4$$



p_x

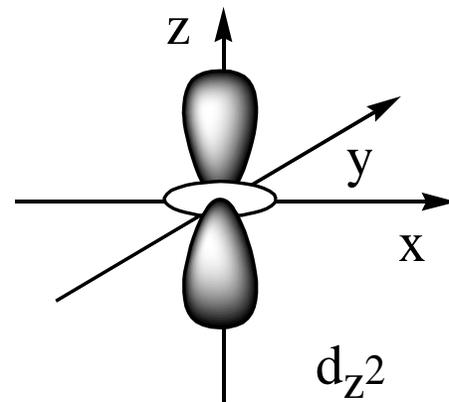
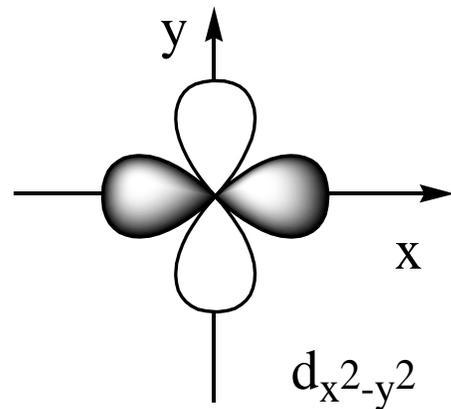
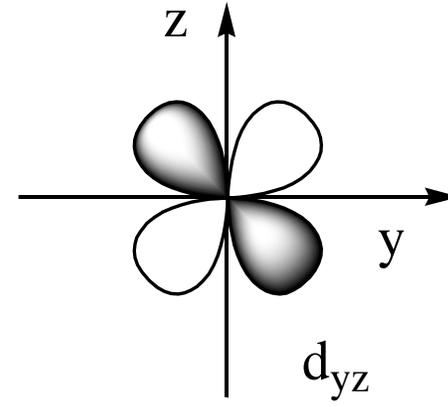
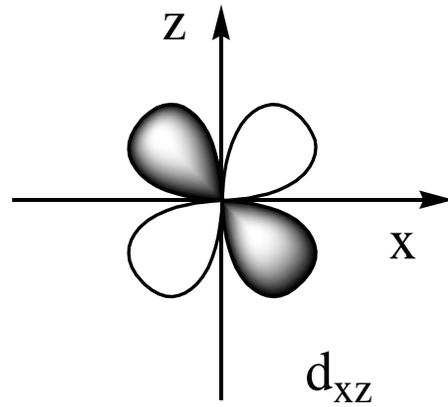
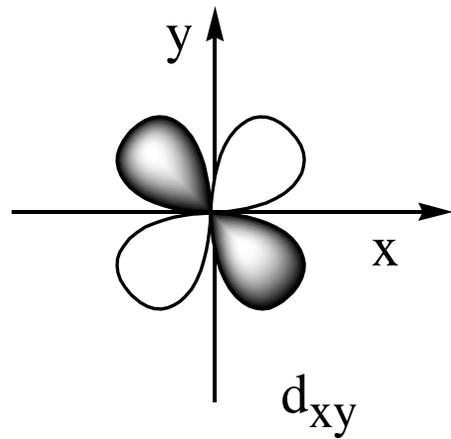


p_y



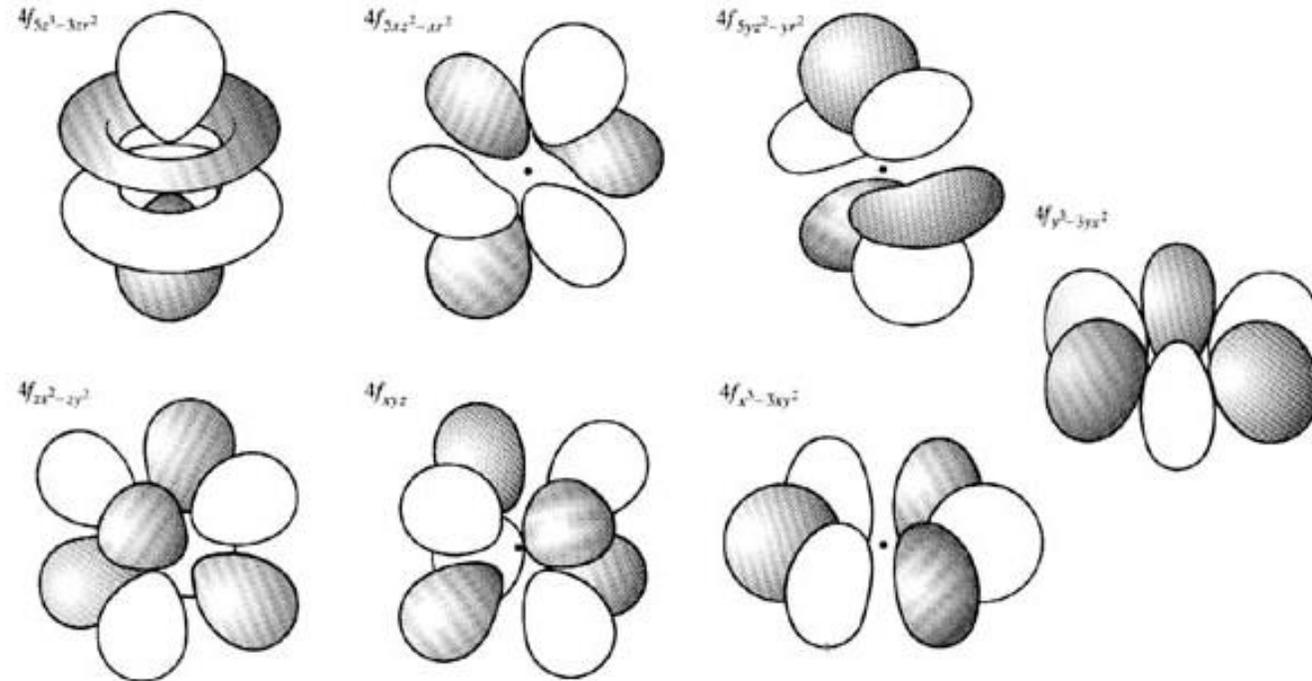
p_z

$n = 3$	$l = 0$	$m = 0$	Ψ_{3s}	1	$n^2 = 9$
$n = 3$	$l = 1$	$m = 0, \pm 1$	Ψ_{3p}	3	
$n = 3$	$l = 2$	$m = 0, \pm 1, \pm 2$	Ψ_{3d}	5	

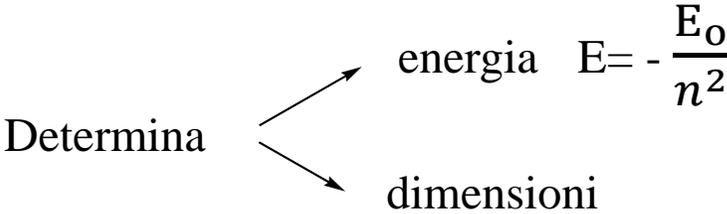


$n=4$	$l=0$	$m=0$	Ψ_{4s}	1	$n^2 = 16$
$n=4$	$l=1$	$m=0, \pm 1$	Ψ_{4p}	3	
$n=4$	$l=2$	$m=0, \pm 1, \pm 2$	Ψ_{4d}	5	
$n=4$	$l=3$	$m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$	Ψ_{4f}	7	

Ψ_{4f} 8 lobi



Riepilogo

<p>- n numero quantico principale $n = 1, 2, 3, \dots$</p> <p>Determina  energia $E = -\frac{E_0}{n^2}$</p> <p>dimensioni</p> <p>per ogni valore di n ci sono n^2 orbitali</p>
<p>- l numero quantico secondario $l = 0, \dots, n-1$</p> <p>determina la forma degli orbitali (2^l lobi)</p> <p>Per ogni valore di n, l può assumere n valori</p>
<p>- m numero quantico magnetico $m = -l \dots 0, \dots + l$</p> <p>determina la direzione degli orbitali</p> <p>Per ogni valore di l, m può assumere $2l + 1$ valori</p>
<p>- m_s numero quantico di spin $m_s = \pm 1/2$</p> <p>determina il verso di rotazione dell'elettrone su se stesso</p>

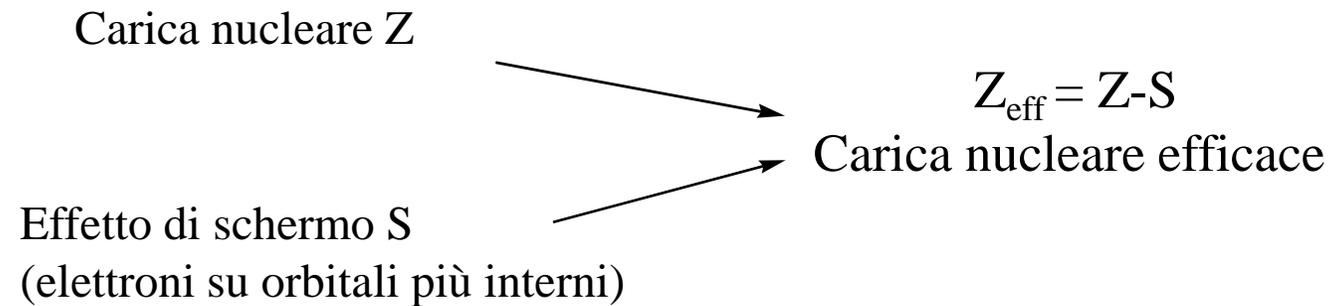
ATOMI POLIELETTRONICI

Impossibile risolvere esattamente l'equazione di Schroedinger

→ Soluzione con metodi approssimati $\Psi_{n,l,m}$

Forma degli orbitali → come per l'atomo di idrogeno

Energia degli orbitali → dipende da n, l



Valore di n	Valore di l			
	0	1	2	3
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		

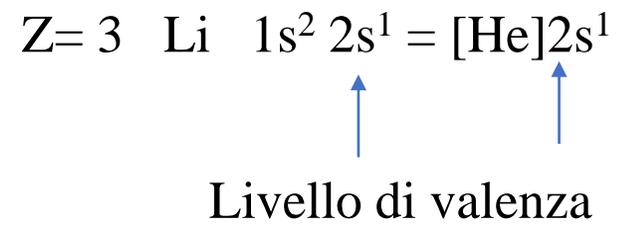
$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6p$

RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI

- Principio di Aufbau
- Principio di esclusione di Pauli
- Principio della massima molteplicità o di Hund

Z			1s
1	H	$1s^1$	$\boxed{\uparrow}$
2	He	$1s^2$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$

I periodo



Z			2s	2p
3	Li	[He] 2s ¹		
4	Be	[He] 2s ²		
5	B	[He] 2s ² 2p ¹		
6	C	[He] 2s ² 2p ²		
7	N	[He] 2s ² 2p ³		
8	O	[He] 2s ² 2p ⁴		
9	F	[He] 2s ² 2p ⁵		
10	Ne	[He] 2s ² 2p ⁶		

II periodo

Z			3s	3p
11	Na	[Ne] 3s ¹	\uparrow	$\square \square \square$
12	Mg	[Ne] 3s ²	$\uparrow\downarrow$	$\square \square \square$
13	Al	[Ne] 3s ² 3p ¹	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \square \square$
14	Si	[Ne] 3s ² 3p ²	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \square$
15	P	[Ne] 3s ² 3p ³	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
16	S	[Ne] 3s ² 3p ⁴	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$
17	Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow$
18	Ar	[Ne] 3s ² 3p ⁶	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

III periodo

Z			2s	2p
3	Li	[He] 2s ¹	\uparrow	$\square \square \square$
4	Be	[He] 2s ²	$\uparrow\downarrow$	$\square \square \square$
5	B	[He] 2s ² 2p ¹	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \square \square$
6	C	[He] 2s ² 2p ²	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \square$
7	N	[He] 2s ² 2p ³	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
8	O	[He] 2s ² 2p ⁴	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$
9	F	[He] 2s ² 2p ⁵	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow$
10	Ne	[He] 2s ² 2p ⁶	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

II periodo

I II
 s^1 s^2

III IV V VI VII VIII
 s^2p s^2p^3 s^2p^5 s^2p^6

1 H																	2 He
3 Li	4 Be	Riempimento orbitali d										5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	7° periodo: 7s, 5f, 6d, 7p							
		58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
		90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

1° periodo: 1s
 2° periodo: 2s, 2p
 3° periodo: 3s, 3p
 4° periodo: 4s, 3d, 4p
 5° periodo: 5s, 4d, 5p
 6° periodo:
 6s, 4f, 5d, 6p

Riempimento orbitali f

Proprietà fisiche

CHIAVE		
NUMERO ATOMICO →	25 54,938	←← peso atomico (1)
SIMBOLO (2) →	Mn 2097	←← punto di ebollizione °C (3)
	1244	←← punto di fusione °C (3)
	7,20	←← densità (gr/c.c.) (4)
NUMERO DI MASSA → DELL'ISOTOPO PIU ABBONDANTE. (5)	55 ; 100	←← percentuale del medesimo isotopo nella composizio- ne naturale. (5)
	MANGANESE	

Proprietà chimiche

CHIAVE		
NUMERO ATOMICO →	25 2;3;4;7	←← numeri di ossidazione (1);
	1,5	←← elettronegatività secondo Pauling; ;
SIMBOLO (3) →	Mn -1,03	} ←← potenziale elettrodico standard (2);
	(2 +)	
	(Ar) 3d ⁵ 4s ²	←← struttura elettronica;
	MANGANESE	←← nome ;

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

POTENZIALE DI IONIZZAZIONE	I
$M_{(g)} + I_1 \rightarrow M^+_{(g)} + e^-$	I_1 potenziale di prima ionizzazione M^+ ione (catione) monovalente
$M^+_{(g)} + I_2 \rightarrow M^{2+}_{(g)} + e^-$	I_2 potenziale di seconda ionizzazione M^{2+} catione bivalente

AFFINITA' ELETTRONICA	A_e
$X_{(g)} + e^- \rightarrow X^-_{(g)} + A_e$	A_e negativa X^- anione

METALLI	I basso	A_e bassa
NON METALLI	I alto	A_e alta (fortemente negativa)

I cresce al crescere del gruppo

decrece al crescere del periodo

A_e cresce (diventa più negativa) al crescere del gruppo

decrece al crescere del periodo