

# 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 ( $d_{\text{rel}} = d_A/d_B = M_A/M_B$ ) 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

$$PM_{H_2O} = 2 \times PA_H + PA_O = 2 \times 1,008 + 15,9999 = 18,015 \approx 18 \text{ u.m.a.}$$

$$PM_{H_2SO_4} = 2 \times PA_H + PA_S + 4 \times PA_O = 2 \times 1 + 32 + 4 \times 16 = 98 \text{ u.m.a.}$$

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

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

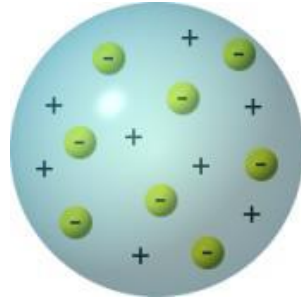
Esempio: 1 mole di acqua ( $H_2O$ ) pesa 18 g; quante moli ci sono in un litro di acqua?

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



# Modelli atomici

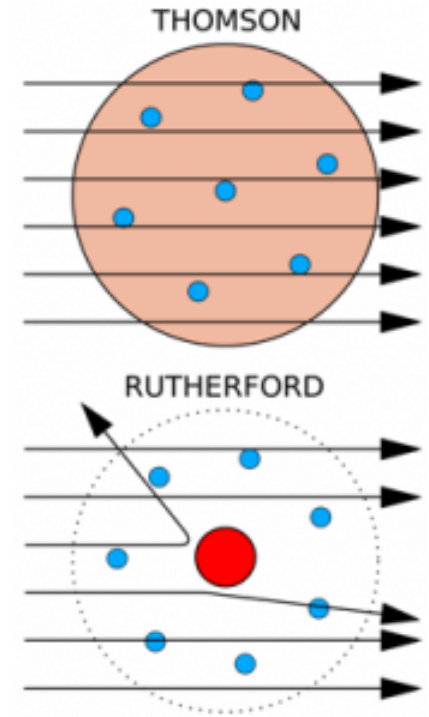
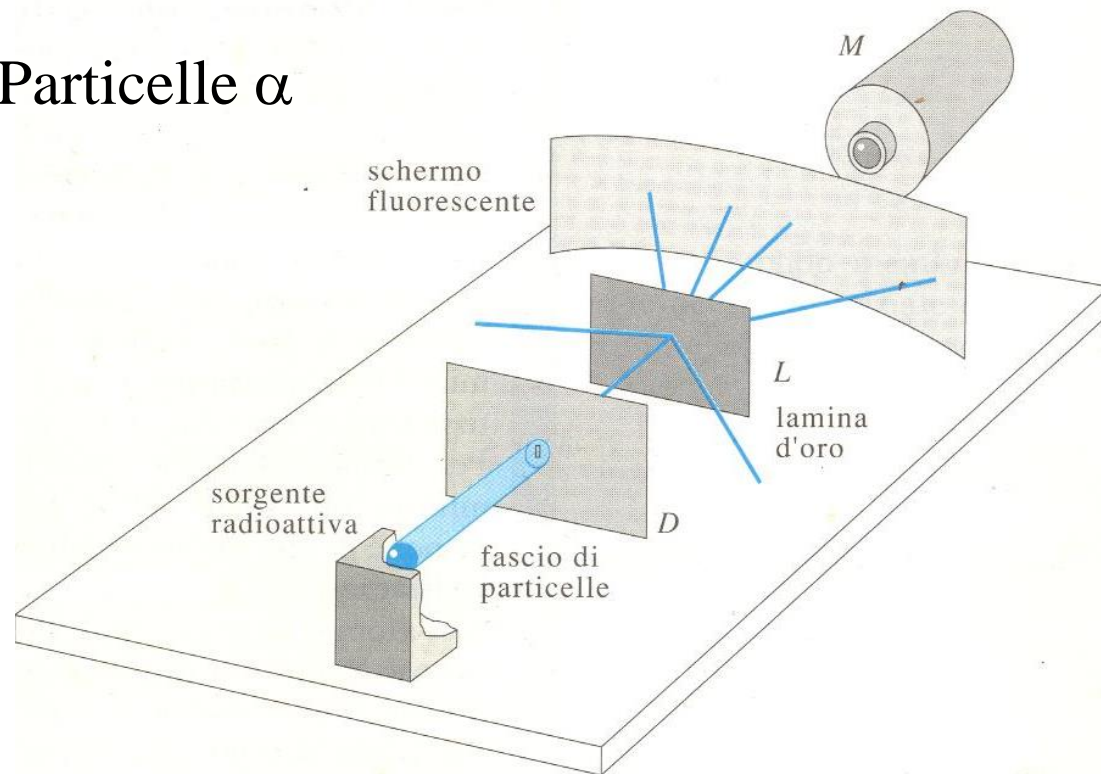
Atomo: elettroni  
protoni  
neutroni



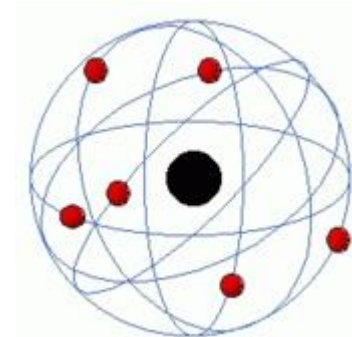
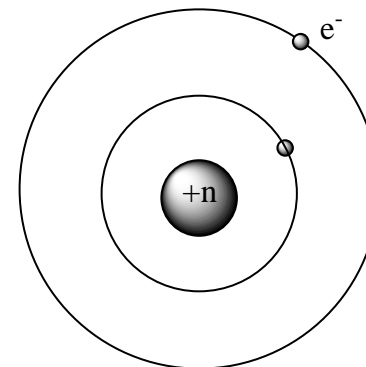
atomo di Thompson

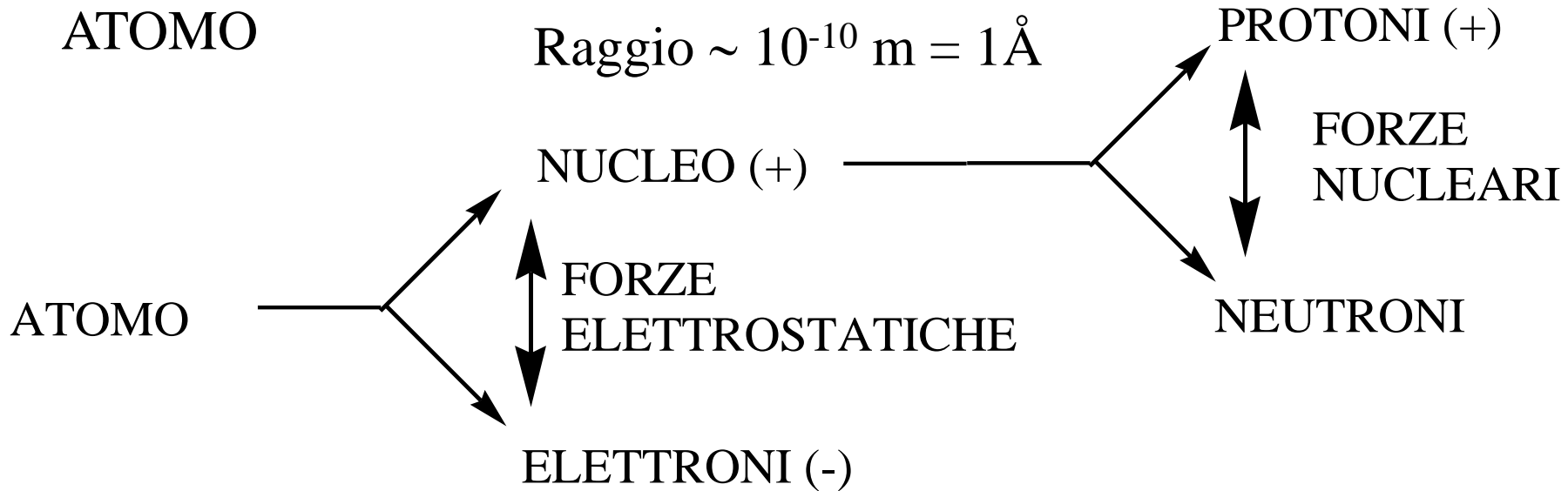
## Esperimento di Rutherford

Particelle  $\alpha$



atomo di Rutherford





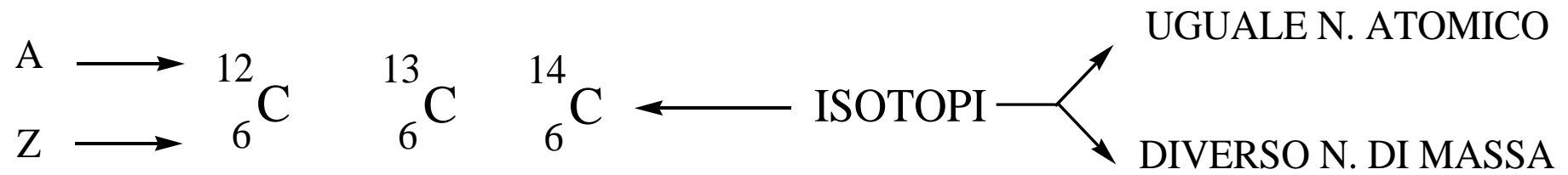
	CARICA	MASSA (kg)
PROTONE	$+1,6 \times 10^{-19} \text{ C (+e)}$	$1,673 \times 10^{-27}$
NEUTRONE	0	$1,673 \times 10^{-27}$
ELETTRONE	$-1,6 \times 10^{-19} \text{ C (-e)}$	$9,11 \times 10^{-31}$

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

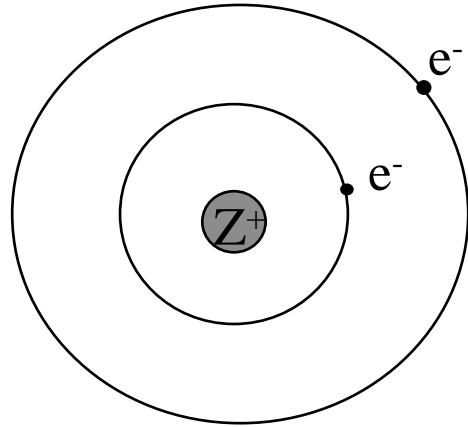
PESO ATOMICO di un elemento =  $\sum_i x_i m_i$

$x_i$  = 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

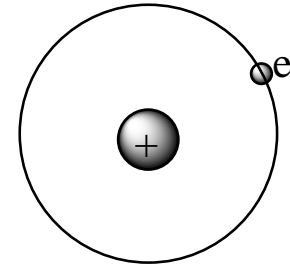
ma solo assumere alcuni valori

Planck → radiazione di corpo nero → quanti



# Atomo di Bohr

## ATOMO di IDROGENO



Quantizzazione del momento angolare

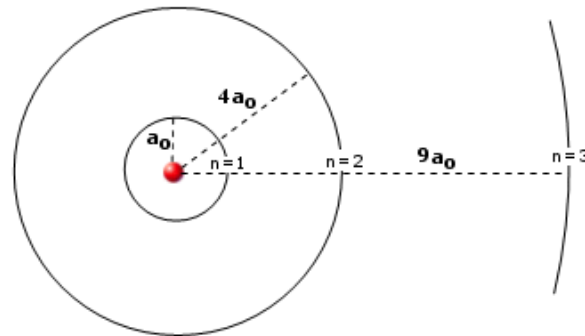
$$m \cdot v \cdot r = \frac{n \cdot h}{2\pi} \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ numero quantico}$$

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

Quantizzazione del raggio atomico

$$r_n = n^2 a_0$$

$a_0 = 0,529 \text{ \AA}$  raggio di Bohr  
 $r = a_0, 4a_0, 9a_0, 16a_0, \dots$



# Quantizzazione dell'energia

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

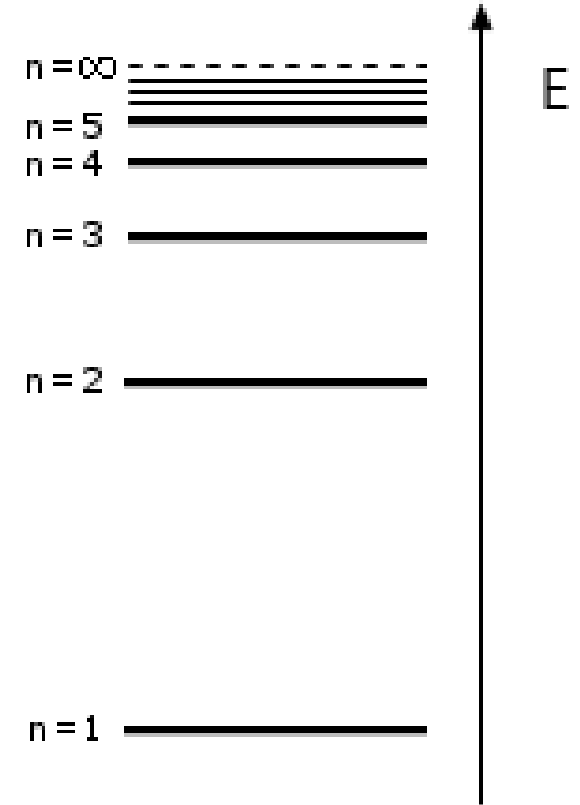
$$E_n = -E_0, -E_0/4, -E_0/9, -E_0/16 \dots$$

$n = 1$  stato fondamentale

$n > 1$  stati eccitati

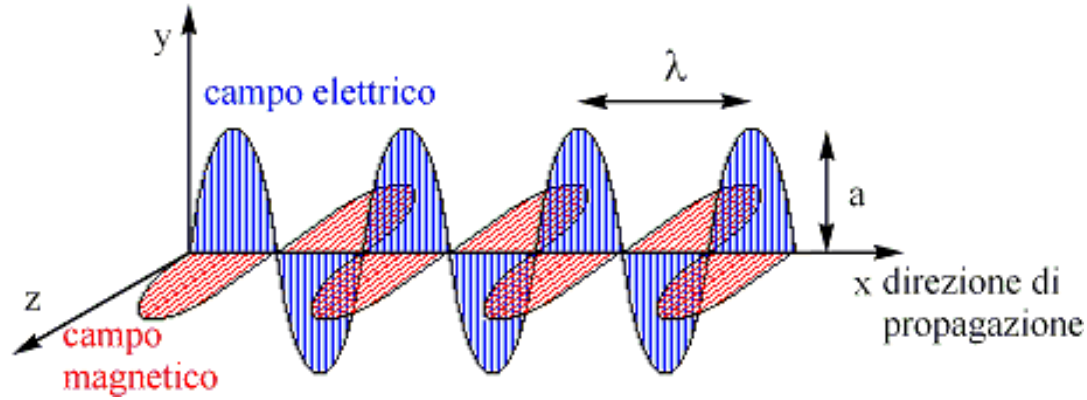
variazione di energia per l'elettrone  
che passa da un livello  $n_1$  ad un livello  $n_2$

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





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



RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

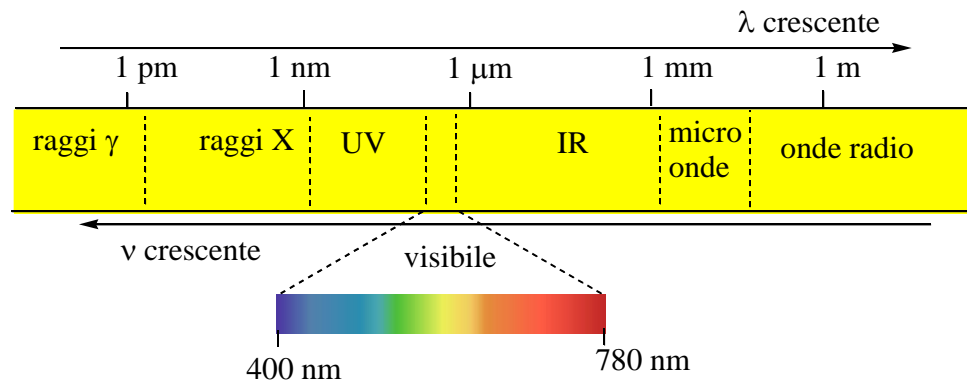
- ↗ ONDA
- ↘ CORPUSCOLO = FOTONE

$\lambda$  = lunghezza d'onda

$\nu$  = frequenza (Hz)

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

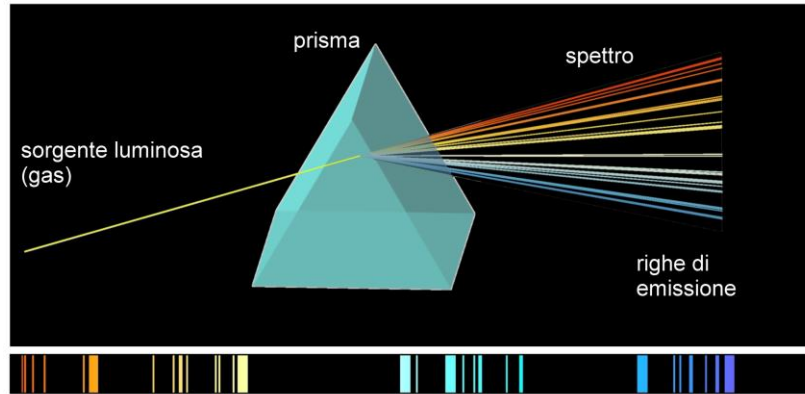
$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$



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



# 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

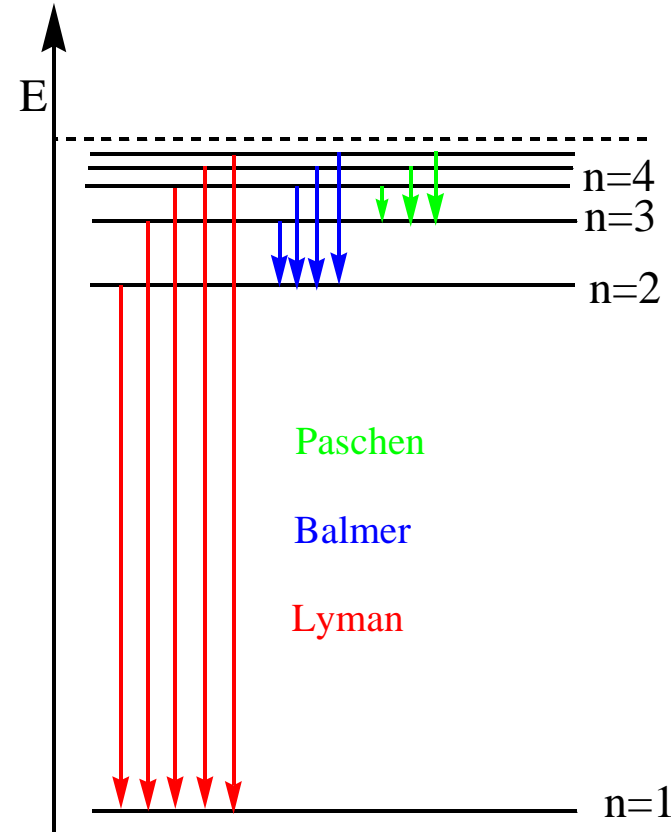
$$R_H = 1,09677 \text{ m}^{-1}$$

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

$n_1 = 1$  serie di Lyman (UV)

$n_1 = 2$  serie di Balmer (visibile)

$n_1 = 3$  serie di Paschen (IR)



Paschen

Balmer

Lyman



# Atomi polielettronici

Numero quantico secondario

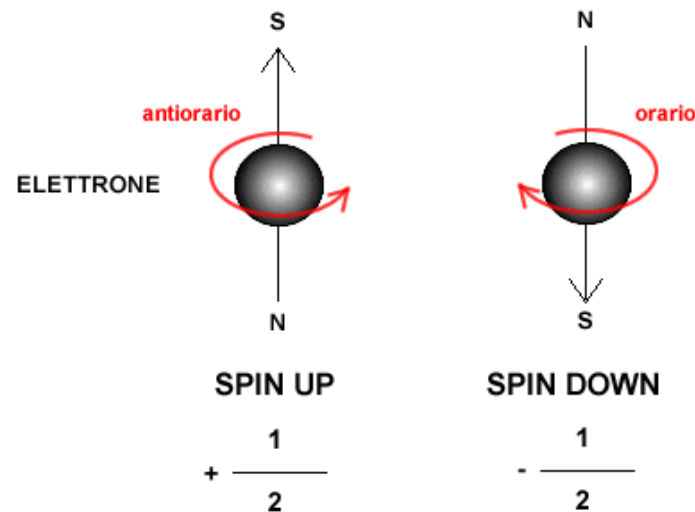
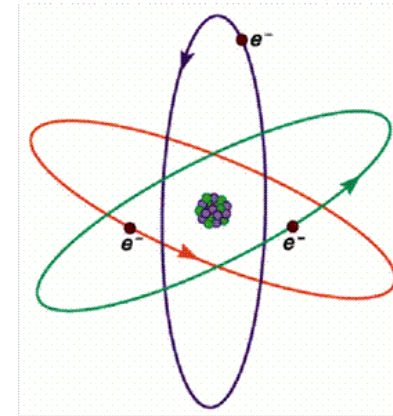
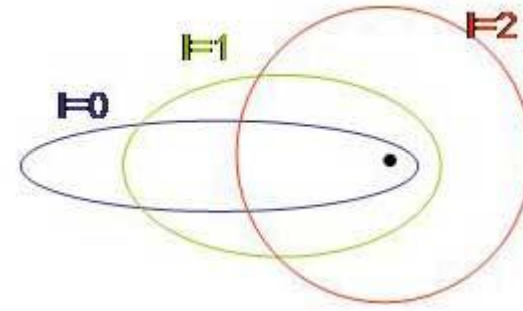
$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

Numero quantico magnetico

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

Numero quantico di spin

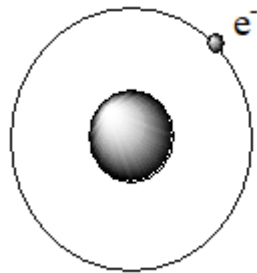
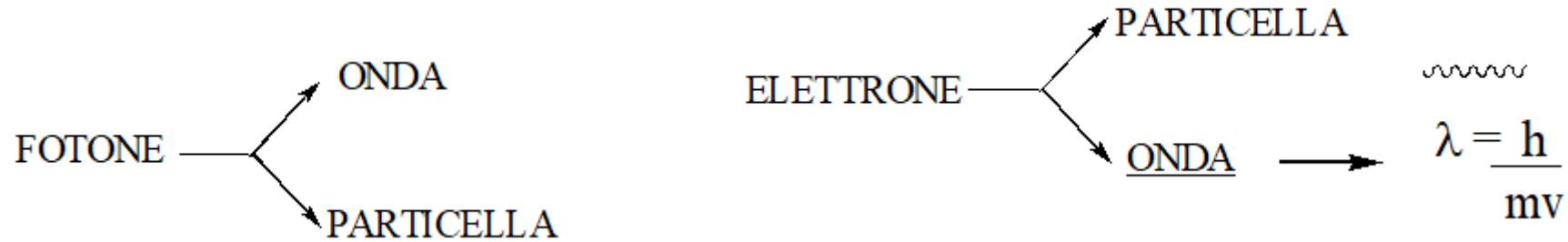
$$m_s = \pm 1/2$$



# MECCANICA QUANTISTICA

DE BROGLIE →

DUPLICE NATURA (CORPUSCOLARE e ONDULATORIA) della MATERIA



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

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

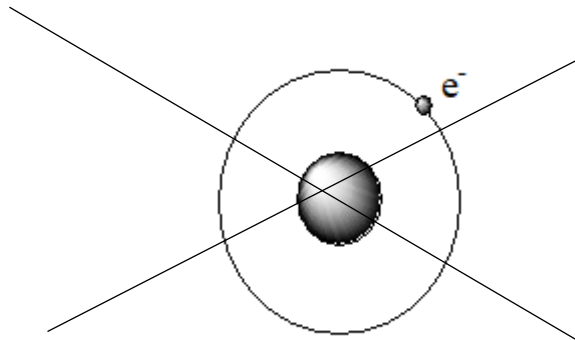
$$mvr = \frac{nh}{2\pi}$$



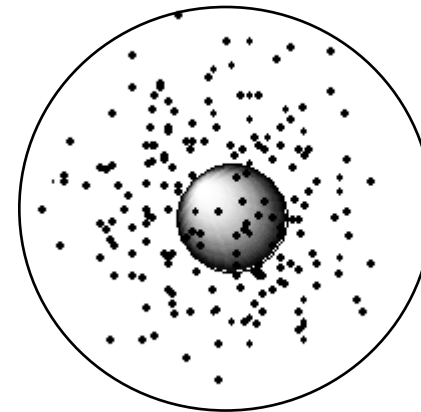
## HEISENBERG → PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE

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



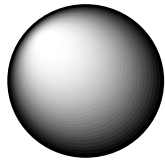
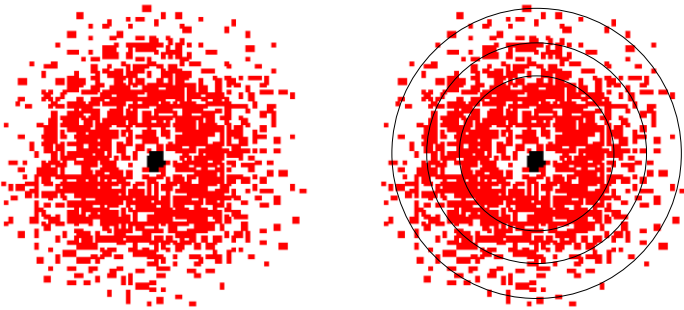
$$n=1, l=0$$

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

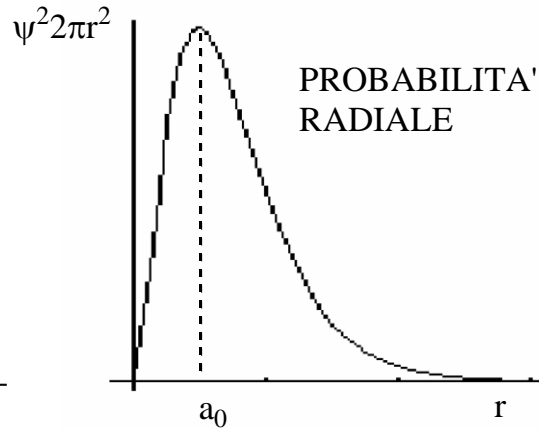
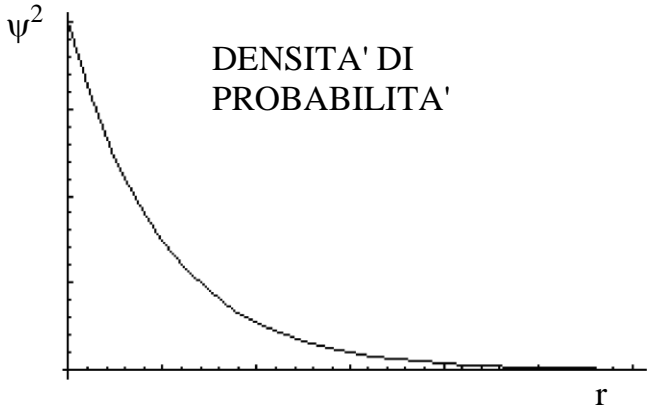
Orbitale 1s

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

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

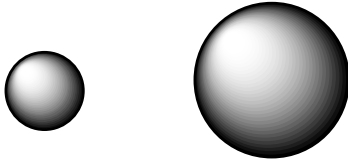


1s



$$n=2, l=0$$

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



1s

2s





$$n=2 \quad l=0 \quad m=0$$

$$\Psi_{2s}$$

1

$$n=2 \quad l=1 \quad m=0, \pm 1$$

$$\Psi_{2p}$$

$$\Psi_{2,1,-1}; \Psi_{2,1,0}; \Psi_{2,1,1}$$

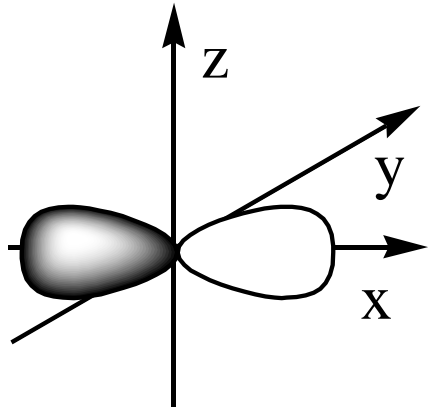
3

$$\Psi_{px}$$

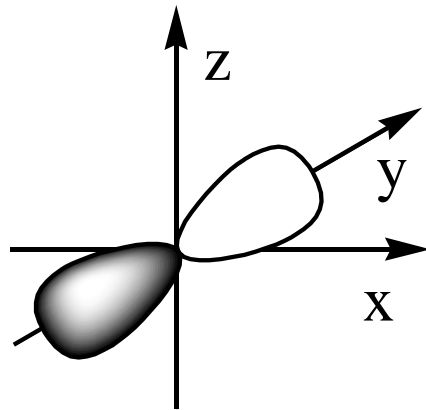
$$\Psi_{pz}$$

$$\Psi_{py}$$

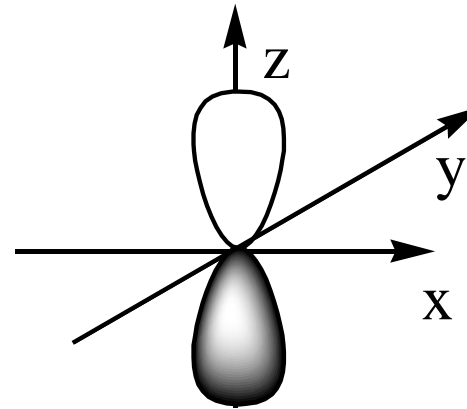
$$n^2 = 4$$



$p_x$



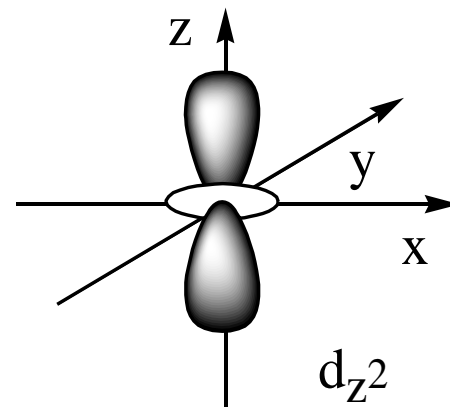
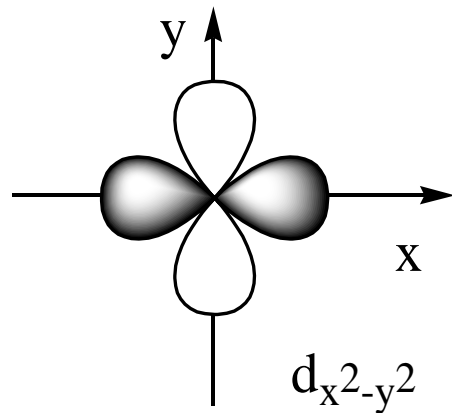
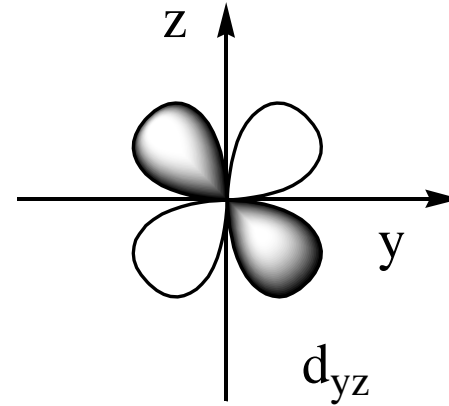
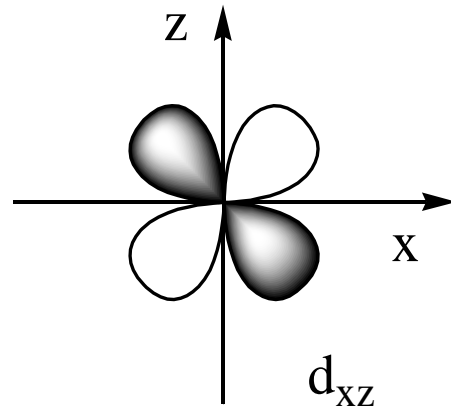
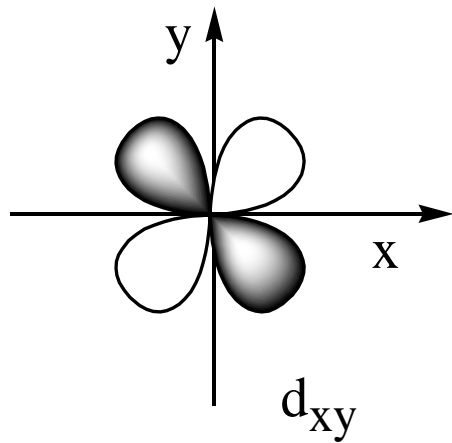
$p_y$



$p_z$



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



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

$\Psi_{4f}$  8 lobi



## Riepilogo

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



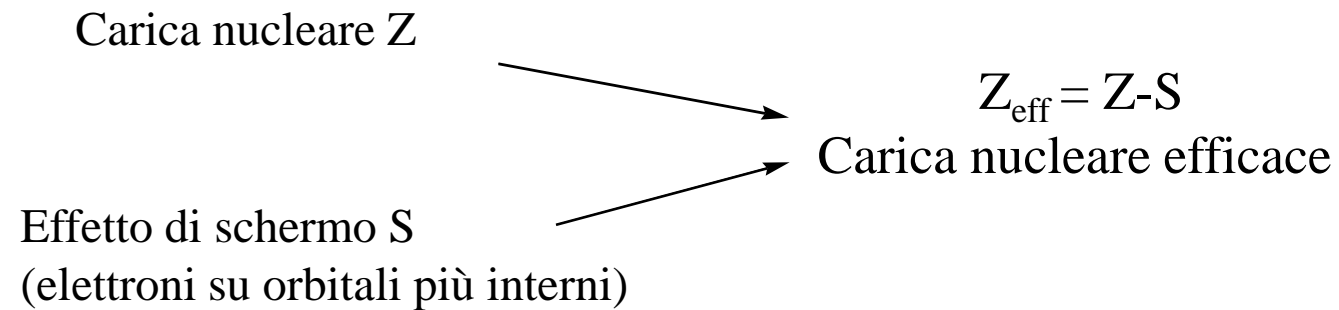
# ATOMI POLIELETTRONICI

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		

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

## RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI

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





Z			2s	2p			
3	Li	[He] 2s <sup>1</sup>	↑	—	—	—	
4	Be	[He] 2s <sup>2</sup>	↑↓	—	—	—	
5	B	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	↑↓	↑	—	—	
6	C	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	↑↓	↑	↑	—	
7	N	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	↑↓	↑	↑	↑	II periodo
8	O	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	↑↓	↑↓	↑	↑	
9	F	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
10	Ne	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	





Z			3s	3p		
11	Na	[Ne] 3s <sup>1</sup>	↑	—	—	—
12	Mg	[Ne] 3s <sup>2</sup>	↑↓	—	—	—
13	Al	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	↑↓	↑	—	—
14	Si	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	↑↓	↑	↑	—
15	P	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	↑↓	↑	↑	↑
16	S	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	↑↓	↑↓	↑	↑
17	Cl	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	↑↓	↑↓	↑↓	↑
18	Ar	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓

III periodo

Z			2s	2p		
3	Li	[He] 2s <sup>1</sup>	↑	—	—	—
4	Be	[He] 2s <sup>2</sup>	↑↓	—	—	—
5	B	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	↑↓	↑	—	—
6	C	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	↑↓	↑	↑	—
7	N	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	↑↓	↑	↑	↑
8	O	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	↑↓	↑↓	↑	↑
9	F	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	↑↓	↑↓	↑↓	↑
10	Ne	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓

II periodo



I II  
 $s^1$   $s^2$

III IV V VI VII VIII  
 $s^2p^1$   $s^2p^3$   $s^2p^5$   $s^2p^6$

1 H	Riempimento orbitali d																2 He
3 Li	4 Be											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								

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

Riempimento orbitali f



## Proprietà fisiche

CHIAVE		
NUMERO ATOMICO →	<b>25</b> 54,938	←← peso atomico (1)
SIMBOLO (2) →	<b>Mn</b> 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

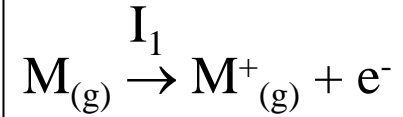
CHIAVE		
NUMERO ATOMICO →	<b>25</b> 2;3;4;7	←← numeri di ossidazione (1);
	1,5	←← elettronegatività secondo Pauling; ;
SIMBOLO (3) →	<b>Mn</b> -1,03	} ←← potenziale elettrodico standard (2);
	(2 +)	
	(Ar) 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	←← struttura elettronica;
	MANGANESE	←← nome ;



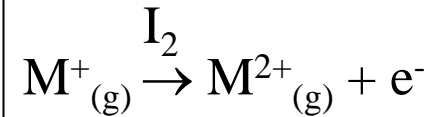
# PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

## POTENZIALE DI IONIZZAZIONE

I



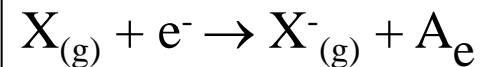
$I_1$  potenziale di prima ionizzazione  
 $M^+$  ione (catione) monovalente



$I_2$  potenziale di seconda ionizzazione  
 $M^{2+}$  catione divalente

## AFFINITA' ELETTRONICA

$A_e$



$A_e$  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

