RIPASSO CHIMICA GENERALE 03/03/22

* ORBITALE ATOMICO

n (numero quantico PRINCIPALE) → Energia e dimensione

ℓ (numero quantico AZIMUTALE) → Forma (momento angolare)

m_ℓ (numero quantico MAGNETICO) → Orientazione nello spazio

* NUMERO QUANTICO ℓ

Dipende da n e assume n valori:

$$0 \leq \ell \geq n-1$$

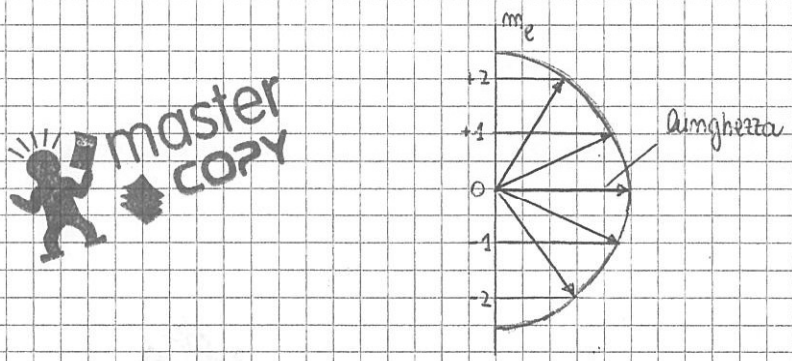
ed è legato al momento angolare orbitale dell'elettrone.

* NUMERO QUANTICO m_ℓ

Dipende da ℓ e assume $2\ell+1$ valori:

$$-\ell \leq m_\ell \geq +\ell$$

ed è legato all'orientazione del momento angolare orbitale dell'elettrone rispetto ad un asse arbitrario.



Si tratta del modello vettoriale del momento angolare: ciò che si può sapere è la sua dimensione perché legata alla rotazione dell'elettrone attorno al nucleo.

Tutti gli orbitali che hanno un $\ell \neq 0$ presentano tutti un piano nodale che passa per il nucleo.

Nota la dimensione, la grandezza del modulo del momento angolare si può risalire alla dimensione della sua proiezione lungo un asse (solo). Inoltre, fornisce la direzione, l'ORIENTAMENTO del vettore: entrambe sono dati dal numero QUANTICO MAGNETICO, m_ℓ.

* ORBITALI 1s e 2s

Hanno una distribuzione della densità elettronica tale che il massimo del ϕ è nel nucleo: momento angolare = 0.

All'aumentare del NUMERO QUANTICO, aumentano i PIANI NODALI.

* ORBITALI 2p

L'elettrone presenta un MOMENTO ANGOLARE, non lo possiamo pensare delocalizzato, fermo, ma come una cosa che ruota intorno al nucleo. Quindi presenta una probabilità pari a 0 di trovarsi nel nucleo.

* ORBITALI 3d

Vi è la possibilità di avere $l = 0$ (orbitale s), $l = 1$ (orbitale p) ed $l = 2$; in questo caso il vettore si può orientare in 5 maniere diverse.

* ORBITALI 4f

master COPY

- Quando vi è un solo elettrone, l'energia dipende ESCLUSIVAMENTE dal numero quantico PRINCIPALE. Prendono il nome di ATOMO IDROGENOIDE. Es: He^+, Li^{2+}, B^{+4}
Per essi, tutti gli orbitali appartenenti al medesimo guscio o strato sono DEGENERI, cioè con la stessa energia.

- Quando cominciamo ad esserci dei SOTTOSTRATI, si perde la degenerazione tra orbitali che possiedono lo stesso n, ma l diverso. Quindi si presentano:

$$s < p < d < f$$

Soltanto orbitali che differiscono per il solo numero quantico m$_l$ rimangono degeneri.

* SPIN ELETTRONICO

S: ampiezza del momento angolare di spin

m$_s$: numero quantico di spin.

master COPY

- L'elettrone ha due possibilità di MOMENTO ANGOLARE:
  a) la ROTAZIONE intorno al NUCLEO;
  b) la ROTAZIONE intorno a SE'.

master COPY

- Il numero quantico di spin (m$_s$) può essere $-\frac{1}{2}$ e $+\frac{1}{2}$ (proiezione dell'asse z) ed è un vettore con la sua lunghezza e si può orientare soltanto in due modi.

CONFIGURAZIONE ELETTRONICA: elenco di tutti gli orbitali occupati, insieme al numero di elettroni presenti in essi.

STATO FONDAMENTALE: gli orbitali vengono occupati in modo da rendere minima l'energia dell'atomo.

* PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI

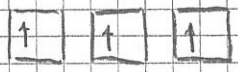
• Nello stesso atomo non vi possono essere due elettroni caratterizzati dal medesimo insieme di numeri quantici.

• Un orbitale può essere occupato al MASSIMO da DUE ELETTRONI e in questo caso i loro spin devono appaiarsi.



* REGOLA DI HUND

• Se in un sottostrato si dispone di più di un orbitale degenere, associare gli elettroni, con spin parallelo, a orbitali distinti anziché appaiarne due in uno stesso orbitale.



* AUFBAU

Il procedimento utilizzato per formulare la configurazione di stato fondamentale di un elemento.

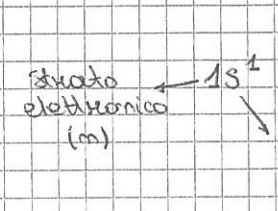
1) Riempire gli orbitali in ordine di energia crescente;
2) Non mettere più di due elettroni in ciascun orbitale;
3) Se si dispone di più orbitali degenere associare gli elettroni con spin parallelo a orbitali distinti anziché appaiarne due su solito orbitale.

* NOTAZIONE DELLA CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

H  Notazione A CASELLE

1s





Notazione SPETTROSCOPICA



• La configurazione ESTERNA conferisce agli atomi le proprietà CHIMICHE.

* LUNGO IL PERIODO

• Il numero atomico Z (CARICA NUCLEARE) AUMENTA mentre n rimane COSTANTE. => l'ATTRAZIONE DEL NUCLEO sugli ELETTRONI DI VALENZA AUMENTA lungo il PERIODO.

* LUNGO UN GRUPPO

• Z (CARICA NUCLEARE) aumenta ma AUMENTA anche n => l'ATTRAZIONE DEL NUCLEO sugli ELETTRONI DI VALENZA rimane pressoché COSTANTE.

• Il RAGGIO ATOMICO DIMINUISCE lungo il periodo e AUMENTA lungo il gruppo.

*ENERGIA DI IONIZZAZIONE I

• Energia MINIMA necessaria per estrarre l'elettrone più esterno ad un atomo neutro e isolato. Essa è tanto MAGGIORE quanto più l'elettrone è attratto dal nucleo.

• AUMENTA lungo il PERIODO e DIMINUISCE lungo il GRUPPO.
Le piccole deviazioni sono dovute alle repulsioni interelettroniche.

* ELETTRONEGATIVITÀ χ

• Capacità di un ATOMO di attrarre a sè gli elettroni di legame.
Il FLUORO è l'atomo più ELETTRONEGATIVO. (3.98)

• In genere: AUMENTA lungo il PERIODO e DIMINUISCE lungo un GRUPPO.
Nella tavola periodica gli elementi più elettronegativi si trovano in alto a destra e quelli elettropositivi in basso a sinistra.

*LEGAME CHIMICO

• È una CONNESSIONE TRA ATOMI e avviene se e solo se la risultante disposizione dei nuclei e degli elettroni possiede energia minore di quella totale corrispondente ai due atomi isolati.

- LEGAME IONICO: uno o più elettroni vengono trasferiti da un atomo all'altro
Gli ioni sono tenuti insieme dalla FORZA ELETTROSTATICA.

- LEGAME COVALENTE: alcuni degli elettroni sono condivisi dai due atomi.
Si formano molecole distinte.

- LEGAME METALLICO: un gran numero di cationi è tenuto insieme da un mare di elettroni.

*LEGAME COVALENTE

1) OMOPOLARE (fra atomi di uguale elettronegatività) => PURO
2) POLARE (fra atomi di diversa elettronegatività)



H_2, Cl_2, F_2, N_2



HF, HCl

1) COVALENTE OMOPOLARE (PURO): d.e. = 0
2) COVALENTE POLARE: 0 < d.e. < 2
3) IONICO: d.e. > 2

VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion)

*POSTULATI

a) La FORMA di una molecola è determinata dal numero di coppie di elettroni attorno all'atomo centrale e da come queste si orientano intorno all'atomo centrale.

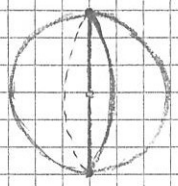
b) Queste coppie possono essere condivise oppure essere coppie solitarie.

c) Per minimizzare le forze di repulsione queste zone si dispongono il più possibile lontano dalle altre (pur mantenendo la stessa distanza dall'atomo centrale);

d) LP (Lone Pairs) occupano più spazio degli elettroni coinvolti in un legame. Doppi legami occupano "più spazio" di legami singoli.
Le forze di repulsione tra le differenti coppie segue l'ordine:

LP-LP > LP-Coppia di legame > coppia di legame - coppia di legame

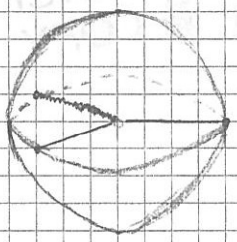
*DUE ZONE AD ELEVATA DENSITÀ



ANGOLO: 180°

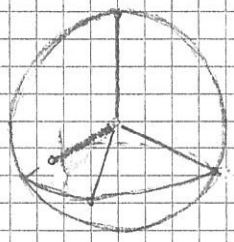
GEOMETRIA: LINEARE

*DUE E TRE ZONE AD ELEVATA DENSITÀ



ANGOLO: 120°

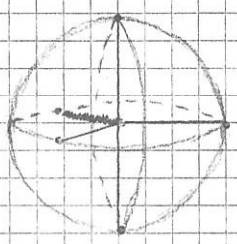
GEOMETRIA: TRIGONALE PLANARE



ANGOLO: 109.5°

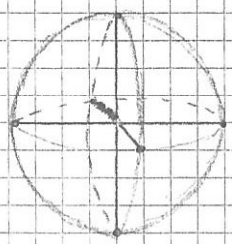
GEOMETRIA: TETRAEDRICA

*CINQUE E SEI ZONE AD ELEVATA DENSITÀ



ANGOLI: 120° e 90°

GEOMETRIA: BIPIRAMIDALE



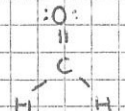
ANGOLO: 90°

GEOMETRIA: OTTAEDRICA

ESEMPIO

CH_2OH (Formaldeide)

C = 4e
H = e
O = 6e
=> 12 e



=> 3 zone ad alta densità => TRIGONALE PLANARE