L'atomo

Il primo a scoprire l'esistenza dell'elettrone è Thomson che dice che l'atomo è una specie di sfera sul quale sono distribuiti gli elettroni (modello a panettone). Passa poco tempo e questo modello va fuori uso grazie a Rutherford che fece un esperimento a dimostrazione che il modello di Thomson era sbagliato: prese una lamina di oro spesso un decimo di micron sparandoci sopra un fascio di particelle alfa. Se il modello di Thomson fosse stato giusto avrebbe dovuto osservare pochissime variazioni perché la distribuzione della carica sarebbe dovuta essere "spalmata" su tutto l'atomo elettricamente neutro. Quello che osservò furono poche deviazioni di grande entità e alcune particelle che venivano addirittura spinte indietro. La spiegazione che si diede fu che la carica che fa rimbalzare le particelle indietro dovesse essere concentrata in una piccolissima parte(nucleo) il modello che andò a ipotizzare è il modello planetario con al centro il nucleo carico positivamente e gli elettroni a girarci intorno. Due anni dopo l'introduzione di questo modello, Lorentz lo contesta perché se l'elettrone girasse in questo modo attorno al protone andrebbe a perdere energia emettendo un'onda elettromagnetica e finendo per cadere a spirale sul protone. Nel 1913, quindi, Bohr propone un modello che prende in prestito alcuni assiomi della fisica quantistica: all'interno del nucleo sono racchiuse le particelle positive e neutre, gli elettroni viaggiano su orbite stazionarie fisse e non hanno la possibilità di spostarsi da quelle orbite. Il modello di Bohr ha dei limiti ma è abbastanza buono. I postulati di esso possono essere riassunti in: 1) l'atomo si trova normalmente in uno stato stazionario che NON irradia energia 2) l'elettrone può percorrere solo determinate orbite e 3) i passaggi di energia in emissione o ammissione si possono avere solo quando questo atomo passa da uno stato stazionario a un altro. Questa però non è né una teoria ibrida né ortodossa e fallacea perché non va a spiegare i sistemi polielettronici. La soluzione a tutto ciò arriva con il modello quantomeccanico (negli anni 30) partendo dal principio di indeterminazione di Heisenberg che dice che se una particella è molto piccola noi non siamo in grado di conoscere contemporaneamente la sua posizione e la sua velocità e quindi non possiamo definirne la traiettoria. Sfruttando il dualismo onda corpuscolare della materia viene sviluppata l'equazione differenziale di Erwin Shrodinger la cui soluzione permette di ottenere dei parametri che sono funzione di posizione ed energia dell'elettrone (funzione d'onda). Il quadrato di questa funzione d'onda da la probabilità di trovare la particella in un determinato punto nello spazio.

$$\frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\ \psi = 0$$

all'interno i vari parametri che sono presi in considerazione sono m(massa dell'elettrone), E (energia totale dell'elettrone che avrà un contributo di energia potenziale e uno di energia cinetica) e la velocità (differenza tra energia totale e potenziale, quindi praticamente l'energia cinetica). Per questa equazione esistono infinite soluzioni e a ogni valore corrisponde una determinata energia. Da qui vengono fuori i numeri quantici che sono utili a ricavare gli orbitali (zone all'interno delle quali c'è una probabilità massima di trovare un elettrone con enenrgia). I numeri quantici sono:

- **n**: numero quantico principale che va a indicare l'energia dell'orbitale (0,1,….infinito)
- **l**: numero quantico angolare legato a n e indica la forma dell'orbitale (0,1,……n-1)
- **ml**: numero quantico magnetico che indica l'orientazione dell'orbitale (-l……+l)

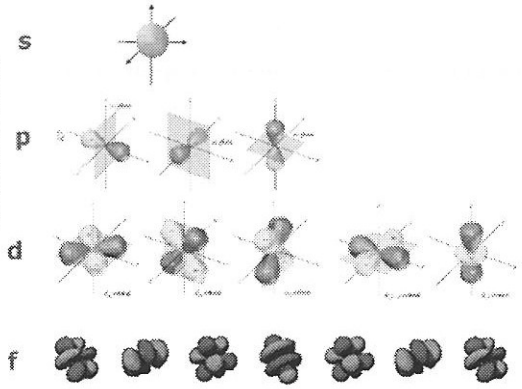
Ogni possibile combinazione dei numeri quantici indica un'orbitale. Per esempio, dall'equazione possiamo vedere che la possibilità di trovare un elettrone nello spazio è massima a 0.529A dal nucleo. La forma non si stende lungo una retta ma lungo un piano: l'orbitale s è una zona sferica, l'orbitale p ha una forma bilobata che si stende attraverso il foglio, gli orbitali d sono anch'essi bilobati ma doppi e gli f sono più complicati e indicano la chimica dei lantanidi.

il *numero quantico principale* n dà un'idea dell'energia dell'orbitale

il *numero quantico del momento angolare* ℓ da un'idea della forma geometrica dell'orbitale nello spazio

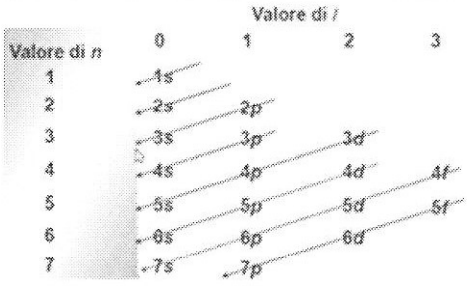
i *numeri quantici del momento magnetico* m ci dicono quanti orbitali sono associati ad ogni valore di ℓ

ℓ = 0	*s*	*1 orbitale*
ℓ = 1	*p*	*3 orbitali*
ℓ = 2	*d*	*5 orbitali*
ℓ = 3	*f*	*7 orbitali*



Quanti elettroni mettere su ogni orbitale? Bisogna considerare il principio di esclusione di Pauli che dice che nessuna coppia di elettroni può avere gli stessi 4 numeri quantici e un orbitale può ospitare due elettroni. A questo proposito viene introdotto un nuovo numero quantico detto orbitale di spin che può assumere solo valori di +1/2 o -1/2 dipendendo dal fatto che l'elettrone ruota sul suo asse e può ruotare in senso orario o antiorario. Nei sistemi polielettronici gli elettroni sono sottoposti a una forza attrattiva esercitata dal nucleo e una repulsiva esercitata dagli altri elettroni. Mentre la componente attrattiva è stabilizzante, quella repulsiva è destabilizzante. Questo profilo si traduce nel fatto che i vari orbitali a seconda della posizione abbiamo contenuti energetici diversi.

Schema empirico da adottare per il corretto riempimento degli orbitali atomici



Si vede così che la sequenza è:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d ... etc

Questo principio di riempimento è detto principio di Aufbau

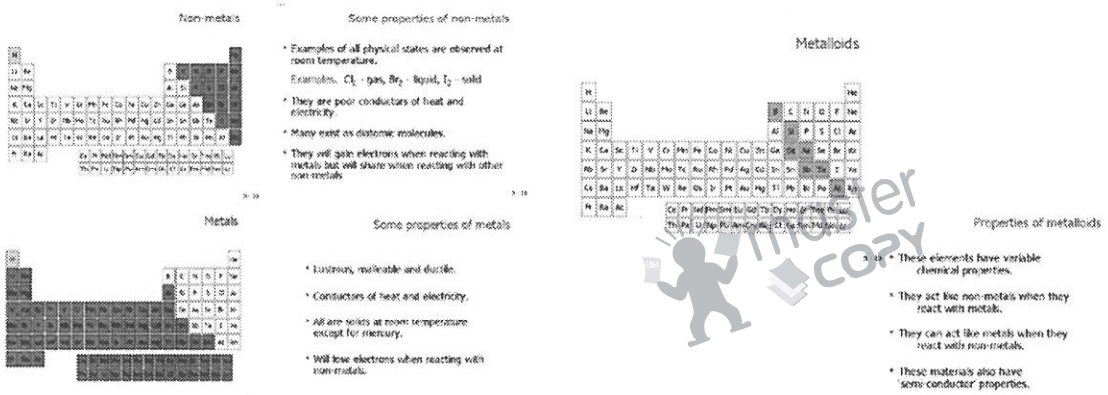
1. un orbitale può contenere al massimo due elettroni
2. gli elettroni devono essere posti in ordine di energia crescente
3. tutti gli orbitali che hanno la stessa energia devono essere riempiti prima di poter cominciare a riempire le caselline successive

4. quando si aggiungono elettroni in orbitali della stessa energia, prima di mettere due elettroni con spin opposti nella stessa casellina devo prima sistemarli singolarmente in ogni casellina perché questo richiede un'energia minore. (regola di Hund)

per un atomo ci sono infinite combinazioni possibili ma solo una corrisponde allo stato di energia più basso dell'atomo. Ci sono eccezioni nel posizionamento di orbitali: nel blocco dei metalli di transizioni si hanno gli orbitali d e a volte l'energia è inferiore se teniamo il substrato d pieno a discapito di un orbitale s (questo succede nel cromo, molibdeno e tungsteno). Alla destra dei metalli di transizione la configurazione diventa s1d10 invece che s2d9 (rame, argento e oro). Conoscere le disposizioni degli elettroni è importante per capire la reattività degli elementi e quindi anche le loro proprietà ma anche per conoscere le proprietà magnetiche. Se ho tutti gli elettroni che sono accoppiati a spin paralleli, per esempio, avrò che questa rotazione si cancella facendomi ottenere un atomo non magnetico (sostanza diamagnetica); avendo un certo numero di elettroni spaiati, questo conferirà alla sostanza un certo magnetismo (paramagnetismo). Queste informazioni ci portano anche a fare deduzioni sui tipi dei legami riguardanti le molecole.

Come si misurano le proprietà magnetiche? La bilancia magnetica fa una prima pesata del campione e la mette in equilibrio, il campione viene poi immerso in un campo magnetico: se la sostanza interagisce con il campo è paramagnetica e quindi è come se pesasse di più perché attratta da forze magnetiche, se il campione non interagisce è diamagnetico e verrà respinto dal campo muovendosi verso l'alto e quindi pesando di meno.

Tutti questi discorsi sono ben ritrovabili nella tavola periodica: ogni riga corrisponde a un valore di n, i gruppi 1 e 2 sono detti del blocco s poiché hanno gli orbitali più esterni sull'orbitale s, dal gruppo 13 al 18 gli orbitali più esterni sono p, i metalli di transizione sono il blocco d e il blocco f è costituito da lantanidi e attinidi. Il peso atomico lo troviamo invece in alto a destra sulle singole caselline della tavola periodica.



Gli ioni monoatomici possono essere carichi sia positivamente (un atomo neutro a cui è stato tolto un elettrone, ione monoatomico positivo) che negativamente (atomo neutro a cui viene aggiunto un elettrone, ione monoatomico negativo. Le configurazioni di questi ioni si fanno con le stesse regole di Aufbau solo che avremo un numero di cariche diverso: per esempio se ho un atomo di zolfo

neutro che termina con 3p4, attribuendogli due cariche negative e rendendolo S2- la sua configurazione cambierà finendo per 3p6.

La tavola periodica sistema gli elementi con una disposizione che ci permette di vedere che alcune proprietà variano in maniera graduale. Le proprietà periodiche riguardano

- **carica nucleare efficace**: quando si va a prendere in considerazione la carica, la vado a considerare da parte di un elettrone esterno che sente attrazione da altri elettroni. "Efficace" perché la presenza di elettroni che si trovano in gusci chiusi tra il nucleo e l'elettrone considerato schermano l'attrazione che il nucleo esercita sull'elettrone.

$Z_{eff} = Z - S$ S = costante di schermo totale

$Z_{eff} = Z - \Sigma \sigma_i$ Z = carica del nucleo; σ = costante di schermo dell'i-esimo elettrone, con Σ estesa a tutti gli elettroni meno quello considerato; $0<\sigma_i<1$

Più elettroni ci sono nel guscio chiuso che scherma il nucleo, più alta sarà la costante di schermo. Gli elettroni che si trovano sullo stesso tipo di orbitale che stiamo considerando si schermano meno. A mano a mano che mi sposto lungo il periodo aumento di uno i neutroni quindi la carica nucleare efficace cresce.
- **Raggio atomico**: si prende in considerazione lo stato elementare di un atomo e si va a guardare la misura della distanza di legame di una molecola biatomica prendendone la metà. Nei campioni metallici si va a prendere la semisomma della distanza tra i nuclei di due atomi vicini. Il raggio atomico cresce lungo il gruppo e diminuisce lungo il periodo perché scendendo lungo un gruppo aumenta il numero quantico principale quindi vado via via verso atomi sempre più grandi mentre se mi sposto lungo il periodo aumenta il numero di elettroni nello stesso guscio orbitalico quindi questo fa aumentare l'attrazione con i protoni nucleari e ho una specie di contrazione, di fattole dimensioni atomiche diminuiscono.
- **Raggio ionico**: negli ioni negativi vanno messi degli elettroni in più aumentando la repulsione con gli altri elettroni quindi l'atomo aumenterà la distanza con gli altri elettroni e il raggio ionico aumenterà. A mano a mano che aumenta la carica negativa lo ione diventa più grande. Togliendo elettroni a uno ione, invece, questo si contrae e la carica efficace aumenta perché sono andata a togliere un elemento di schermo.
- **Energia di prima ionizzazione**: quanto è facile strappare gli elettroni dagli atomi neutri per formare atomi positivi. Prendo un atomo isolato neutro, lo porto allo stato gassoso e gli strappo un elettrone formando uno ione che rimane in stato gassoso. L'energia necessaria a questa operazione è l'energia di prima ionizzazione. Lungo la tavola periodica: scendendo lungo il gruppo l'energia di prima ionizzazione diminuisce poiché l'elettrone più esterno sarà un elettrone sempre più lontano e attratto dal nucleo con una forza sempre minore. Spostandosi lungo il periodo, invece, aumenta perché è sempre più difficile strappare un elettrone.

$$E^{+n-1}(g) + E.I.^{(n)} \rightarrow E^{+n}(g) + e^-$$

Affinità elettronica: variazione di energia quando prendo un atomo neutro e gli attribuisco un elettrone per renderlo negativo. Grandi valori negativi sono osservati nel gruppo 17 ai quali manca

solo un elettrone per raggiungere la configurazione elettronica di un gas nobile. In genere valori molto piccoli di affinità elettronica con processi endotermici si trovano per elementi nella parte sinistra della tavola periodica. Perché l'energia di ionizzazione è più bassa per gli elementi dei primi gruppi (quindi con un numero basso di elettroni)? Perché tirando via questi pochi elettroni si raggiunge un numero di essi che chiude il guscio raggiungendo una situazione stabilizzante.

La tavola periodica

All'interno dei blocchi della tavola periodica possiamo indicare alcune caratteristiche comuni:

- **Blocco s (gruppo 1-2):** sono metalli molto reattivi che formano facilmente cationi e tutti reagiscono con l'ossigeno per dare ossidi con caratteristiche basiche
- **Blocco p (gruppo 13-**18): per gli elementi più pesanti troviamo ancora dei metalli quindi che tendono a perdere elettroni o formare composti con forte caratteristica ionica, tutti gli altri invece hanno tendenza ad acquistare elettroni e chiudere il guscio. In questo blocco troviamo tutti e tre gli stati di aggregazione allo stato elementare.
- **Blocco d (metalli di transizione):** sono tutti molto simili con caratteristiche intermedie tra il blocco s e il p, hanno tanti stati di ossidazione. Con tanti partner di reazione possono formare legami covalenti. A livello di transizioni e reticolo si scambiano abbastanza facilmente.

LE FORMULE CHIMICHE

Le formule chimiche sono un modo condensato di rappresentare un composto. Al loro interno troviamo i simboli che indicano gli elementi che compongono la sostanza e i numeri che indicano i rapporti tra i vari elementi ai pedici con numeri interi (tranne che nei casi in cui i composti vengono indicati con la formula bruta e possono anche avere numeri frazionari).

- **Formula molecolare:** rappresenta la formula che rappresenta la sostanza quindi deve dare il numero esatto di atomi. Ha un significato quantitativo ben preciso da connettere alle moli: ogni pedice è il numero di moli del determinato elemento.
- **Formula empirica (o formula bruta):** è la formula minima che indica il rapporto tra gli atomi presenti nella molecola.

Formula minima ed empirica possono non coincidere. Per esempio, nel glucosio la formula molecolare è C6H12O6 che mi dice che nella molecola ci sono 6 atomi di carbonio, 12 di idrogeno e 6 di ossigeno. La formula minima del glucosio, però, è CH2O che ricavo grazie a un'analisi molecolare delle sostanze. Un altro esempio è visibile nell'anidride fosforosa che ha formula molecolare P4O6 mentre quella empirica è P2O3.Tra la formula molecolare e quella empirica c'è dunque questo fattore che è un numero intero.

Le sostanze ioniche sono tutte quelle sostanze che sono formate da specie cariche positivamente (cationi) e negativamente (anioni) che stanno insieme per un tipo di legame che si chiama ionico (attrazione elettrostatica per la quale ioni di segno opposto si attraggono). Gli ioni possono essere monoatomici (che hanno un solo atomo e di conseguenza una sola carica) o possono essere più