

NUMERI QUANTICI E CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE DEGLI ATOMI

Secondo la teoria atomica derivante dalla meccanica quantistica gli elettroni di un atomo sono contenuti all'interno di orbitali atomici, descritti dalla funzione d'onda ψ derivante dall'equazione di Schrödinger. Il quadrato della funzione d'onda ψ^2 rappresenta la densità di probabilità: la sua variazione nello spazio permette di calcolare le superfici degli orbitali atomici (di solito al 90% o al 95% di probabilità) e quindi rappresentarne la forma. Le soluzioni numeriche della suddetta equazione sono rappresentate dai numeri quantici.

n: num. quantico principale – assume valori interi 1, 2, 3, ecc. Rappresenta:

- Il livello di energia
- La grandezza dell'orbitale

l: num. quantico secondario – assume i valori da 0 a (n-1). Rappresenta:

- Il n° di sottolivelli in ogni livello di energia
- La forma dell'orbitale:
l = 0 orb. S (sferico), l = 1 orb. P (doppio lobo), l = 2 orb. D (4 lobi), ecc.

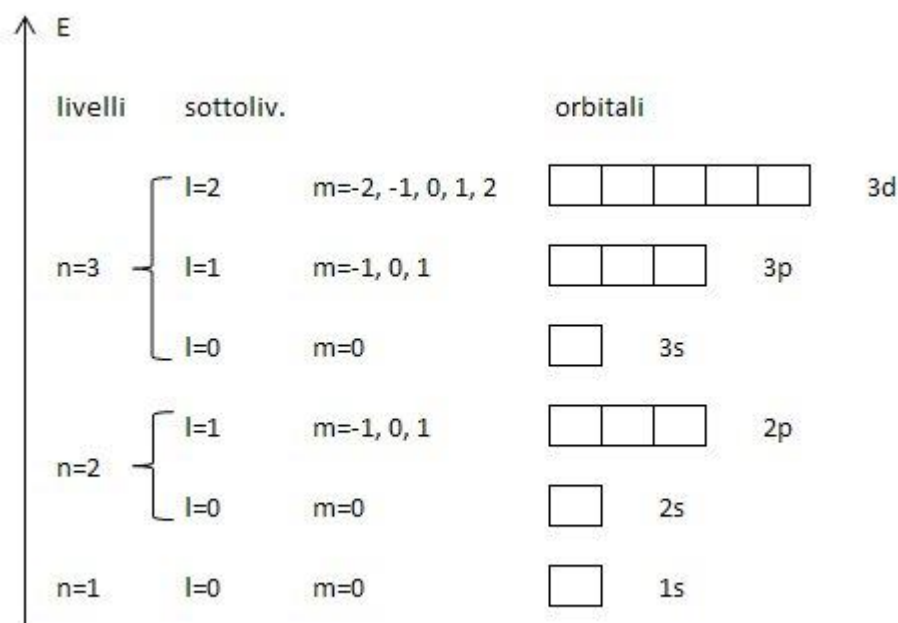
m: num. quantico magnetico – assume (l+1) valori da -l...0...+l. Rappresenta:

- Il n° di orbitali in ogni sottolivello (sempre dispari: 1, 3, 5, 7, ecc.)
- L'orientazione degli orbitali

s: num. quantico di spin – assume i valori $\pm 1/2$. Rappresenta:

- La "rotazione" dell'elettrone sul proprio asse
- Il numero massimo di elettroni che possono essere presenti in ogni orbitale (2 con spin opposto)

Livelli elettronici (atomo di idrogeno)



Regole di riempimento degli orbitali atomici:

- 1) Si dispongono gli elettroni a partire dal livello più basso di energia e si prosegue verso livelli crescenti di energia
- 2) Si segue il principio dell' "aufbau" (massima molteplicità): orbitali appartenenti allo stesso sottolivello (per es. i 3 orbitali p) vanno riempiti prima per metà e quindi, se sono ancora disponibili elettroni, si riempiono completamente
- 3) In ogni orbitale atomico si possono collocare al massimo 2 elettroni con spin opposto

Esempio: ${}^7\text{N}$ $1s^2 2s^2 2p^3$ configurazione elettronica – livello di valenza: 5 elettroni

Ordine di riempimento dei livelli elettronici (atomi polielettronici)

