

STRUTTURA ATOMICA : PRINCIPIO AUFBAU

Uno degli argomenti più importanti nell'insegnamento e nell'apprendimento della chimica è l'uso del principio aufbau per prevedere le configurazioni elettroniche degli atomi e per spiegare la tabella periodica degli elementi. Questo metodo è stato insegnato a molte generazioni di studenti ed è il preferito dagli insegnanti e presente in tutti i testi di chimica. Qui però scopriremo che ha qualche difetto e cercheremo di eliminare la versione non corretta del principio.

L'errore deriva da un tentativo di semplificare le cose per lo studente, ma questo è un comportamento non corretto ed in ogni caso non c'è scusa per perpetuare questo mito educativo.

Il metodo aufbau è stato originariamente proposto dal fisico danese Niels Bohr che è stato il primo ad utilizzare la meccanica quantistica nello studio della struttura atomica ed uno dei primi a dare una spiegazione della tabella periodica in termini di distribuzione di elettroni (configurazioni elettroniche). Bohr ha proposto di pensare alla struttura degli atomi della tavola periodica come progressivamente costruita iniziando dall'atomo più semplice di tutti, quello dell'idrogeno che contiene solo un protone e un elettrone. Gli altri atomi differiscono dall'idrogeno per l'aggiunta progressiva di un protone e di un elettrone. L'elio ha due protoni e due elettroni, il litio ne ha tre, il berillio quattro, fino all'uranio che a quel tempo (1913) era l'atomo più noto, costituito da 92 protoni e 92 elettroni; il numero di neutroni varia negli atomi ma è irrilevante in questa discussione.

Come sappiamo, gli stati energetici dell'elettrone, caratterizzati dalle funzioni d'onda definite orbitali atomici (cioè quelle funzioni matematiche che elevate al quadrato forniscono la probabilità di trovare l'elettrone nel punto descritto dalle coordinate presenti in esse) e che vengono indicati con le lettere s, p, d e f. Man mano che ci si allontana dal nucleo abbiamo a seconda del valore di n (1,2,3,4,5..)

orbitale 1s

orbitali 2s e 2p

orbitali 3s, 3p e 3d

orbitali 4s, 4p, 4d e 4f

Si può facilmente constatare che numero di stati dell'elettrone è dato da $m = 2l + 1$ infatti per $l=0$ il numero di stati è solamente uno, infatti : $m = 2 \times 0 + 1 = 1$ e corrisponde ad uno stato S, se $l=1$ gli stati m sono $2 \times 1 + 1 = 3$ e corrispondono agli stati P(x,y,z) e per $l=2$ gli stati m sono $2 \times 2 + 1 = 5$ corrispondenti ai 5 stati d mentre per $l=3$ gli stati m sono $2 \times 3 + 1 = 7$ che corrispondono ai 7 stati f.

Il modello semplice (aufbau) che governa l'ordine di riempimento degli orbitali è il seguente:

l'ordine di riempimento inizia nella parte superiore del diagramma seguendo le frecce che puntano verso il basso e verso il margine sinistro.

Seguendo questa procedura abbiamo l'ordine di riempimento degli orbitali con elettroni con la seguente sequenza in cui l'energia degli orbitali aumenta da sinistra verso destra :

1s