

SCUOLA ESTIVA DI RICERCA EDUCATIVA E DIDATTICA DELLA CHIMICA "ULDERICO SEGRE" VI edizione 12 – 15 settembre 2014 RENDE (CS)

Dalla configurazione elettronica al Sistema Periodico

La edizione 2014 della Scuola si aprirà con la consegna della Medaglia Illuminati da parte del Presidente SCI, prof. Raffaele Riccio

Sede della Scuola

Le attività didattiche si svolgeranno presso il Campus dell'Università della Calabria, Rende (Cs), Aula "Mario Terenzi", Cubo 12c, V piano (www.unical.it).

Destinatari

Il personale docente universitario e, in particolare, giovani laureati, dottorandi e ricercatori.

Durata

La scuola avrà inizio nel pomeriggio di venerdì 12 settembre e terminerà lunedì 15 settembre 2014.

Iscrizione e borse

La tassa di iscrizione di **350** € comprende la partecipazione alla scuola, i materiali, il pernottamento dal 12 al 15/9 incluso in residenza universitaria in camera doppia, i pranzi e le cene.

E' possibile altresì una tassa di iscrizione ridotta (200 €) non comprensiva di pernottamenti e cene.

Il bonifico dovrà essere intestato a:

Società Chimica Italiana - Divisione di Didattica

Banca Prossima - IBAN: IT87 V033 5901 6001 0000 0074 996

Causale: Cognome e nome - Iscrizione Segre 2014

Il personale universitario (strutturato e non strutturato) interessato a una borsa di partecipazione è invitato a richiederla direttamente al **referente per il Piano Lauree Scientifiche della propria sede**.

Le domande di partecipazione devono essere inviate a:

elena.ghibaudi@unito.it entro il **20 luglio 2014**, allegando il modulo di iscrizione scaricabile dal sito http://www.soc.chim.it/it/divisioni/didattica/home

Comitato scientifico e organizzatore

Aldo Borsese, Michele A. Floriano, Elena Ghibaudi, Alberto Regis, Antonella Rossi, Silvana Saiello, Giovanni Villani, Sergio Zappoli



SCUOLA ESTIVA DI RICERCA EDUCATIVA E DIDATTICA DELLA CHIMICA "ULDERICO SEGRE" VI edizione 12 – 15 settembre 2014 RENDE (CS)

Dalla configurazione elettronica al Sistema Periodico

Programma

Venerdì 12 Settembre

ore 15.00 - Consegna della Medaglia Illuminati da parte del Presidente SCI Prof. Raffaele
Riccio

Apertura dei lavori della scuola Segre da parte del coordinatore e presentazione del programma.

Presentazione dei docenti e dei corsisti

ore 15.30-16.30 - **Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi)**: Discussione delle elaborazioni individuali messe a punto dai partecipanti prima della Scuola sui temi sottoindicati e preparazione di una presentazione riassuntiva da parte di ciascun gruppo

TEMI

- Come insegnare le configurazioni elettroniche (eventualmente limitandosi a sotto-temi, quali: configurazioni di K, Ca ed elementi della prima riga di transizione, la regola di Madelung, le configurazioni anomale di Cr, Cu e altri elementi, ecc.)
- Secondo voi, gli orbitali sono osservabili?
- Quale definizione dareste di elemento chimico?
- Come insegnereste le proprietà periodiche?

ore 16.30-17.00 - INTERVALLO

ore 17.00-18.15 - Presentazioni dei lavori dei gruppi e discussione

ore 18.15-18.30 - **Conclusioni** della I giornata, a cura del coordinatore

Sabato 13 Settembre

ore 9.30-11.00 - **Eric Scerri (UCLA, Los Angeles):** The teaching of electronic configurations, aufbau principle and electronic structure

ore 11.00-11.30 - INTERVALLO



ore 11.30-13.00 - **Discussione**

ore 13.00-14.30 - PRANZO

ore 14.30-15.30 - **Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi)**: Rielaborazione delle relazioni presentate il giorno precedente, alla luce degli elementi emersi dalla discussione del mattino

ore 15.30-16.00 - **Discussione**

ore 16.00-16.30 - INTERVALLO

ore 16.30-17.30 - **Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi):** esame critico di alcuni estratti da libri di testo universitari riguardanti i temi trattati nella scuola.

ore 17.30-18.15 - **Discussione**

ore 18.15-18.30 - Conclusioni della II giornata, a cura del coordinatore

Domenica 14 Settembre – giornata MACRO

ore 9.30-10.30 -	Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi):	I criteri di classificazione degli
	elementi di Mendeleev	

ore 10.30-11.00 - **Elena Ghibaudi (Univ.Torino e gruppo SENDS):** La definizione di elemento chimico. Ambiguità e incongruenze di un concetto fondante

ore 11.00-11.30 - INTERVALLO

ore 11.30-13.00 - **Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi):** Ragionando di sostanze semplici, atomi, elementi....

ore 13.00-14.30 - PRANZO

ore 14.30-15.15 - Alberto Regis (Gruppo SENDS): Struttura gerarchica della chimica di base

ore 15.15-16.15 - **Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi):** Tavola periodica e registri di concettualizzazione: quali dati per l'elemento 117?

ore 16.15-16.45 - INTERVALLO

ore 16.45-17.30 - **Roberto Zingales (Univ. Palermo)** : *Riflessioni sulle proprietà predittive della Legge di Periodicità* - DA CONFERMARE

ore 17.30 -18.15 - **Discussione**

ore 18.15-18.30 - **Conclusioni** della III giornata, a cura del coordinatore

Lunedì 15 Settembre – giornata MICRO

ore 9.30-10.30 - **Esercitazione dei corsisti (in piccoli gruppi):** Analisi di brani scelti da testi universitari sui principali concetti quantistici.



ore 10.30-11.00 -	Presentazione delle analisi svolte	
ore 11.00-11.30 -	INTERVALLO	
ore 11.30-12.15 -	Giovanni Villani (CNR-Pisa): Una nuova prospettiva per il concetto di orbitale. Confronto con le usuali impostazioni	
ore 12.15-12.45 -	Discussione	
ore 13.00-14.30 -	PRANZO	
ore 14.30-15.30 -	Antonella Rossi (Univ. Cagliari): Esistono evidenze sperimentali sulla configurazione elettronica degli atomi?	
ore 15.30-16.30 -	Discussione	
ore 16.30-17.00 -	INTERVALLO	
ore 17.00 -18.45 -	Tirare le somme e progettare il futuro: discussione conclusiva sulla Scuola Segre, moderata dal coordinatore	
ore 18.45-19.00 -	Conclusioni a cura del coordinatore	



Workshop of electronic configurations, Madelung rule, anomalous configurations and related questions

Eric Scerri
Department of Chemistry & Biochemistry
UCLA
Los Angeles

Website: www.ericscerri.com

The topic of atomic structure and electronic configurations is an important one in the chemistry curriculum. It is also rather challenging for chemistry educators given that it draws heavily from the discipline of physics that for many chemists is alien territory.

The workshop will examine the teaching of electronic configurations in general by taking a historical and philosophical approach in addition to examining the basic physics involved.

One particular source of problems is the question of the relative occupation and ionization of atoms of the elements in the fourth period, beginning with potassium and calcium and moving onto the first transition series. There are many approaches to teaching this topic and it is important to avoid introducing any misconceptions for the sake of simplifying what we tell students. Another aspect of this topic is the Madelung or n + l rule. There appears to be some confusion as to whether this rule is sometimes violated or not and if so precisely what the violation consists of.

Still on the subject of the first transition series, two elements chromium and copper are said to display anomalous configurations. Students correctly ask for explanations for these cases and different chemical educators and different textbooks frequently give different explanations. The workshop will aim to reach a deeper understanding of anomalous configurations in the first as well as subsequent transition series.

Having dealt with these specific issues we will turn to considering more general issues such as the nature of orbitals and whether they are in any sense 'real' and whether they can be observed. Even more generally there is the seldom discussed, but fundamental, question of what the term 'element' means. In the English language and many other languages the term is used confusingly in at least two different senses while this difference is never made explicit. One speaks of the element sodium that is present in sodium chloride and one also speaks of sodium to denote the isolated grey element that is kept in jars of unreactive organic solvents. What do these two kinds of element have in common and what sense of the term element is applicable to the species that are displayed on the periodic table?



Il sistema periodico degli elementi: un'invenzione eccezionale

Elena Ghibaudi^{a, b}, Alberto Regis ^b, a Dipartimento di Chimica, Università di Torino, Via Giuria 7, 10125, Torino, Italy b Gruppo SENDS, Storia ed epistemologia per una nuova didattica delle scienze elena.ghibaudi@unito.it; req.al@alice.it

Si suggerisce spesso di utilizzare la storia della chimica nell'insegnamento della disciplina, in base a un possibile parallelismo tra i processi di apprendimento e le tappe di elaborazione del sapere scientifico. L'elaborazione del sistema periodico degli elementi è il prodotto finale di una lunga serie di tentativi, compiuti da diversi scienziati, per cercare di «mettere ordine» nel mondo delle sostanze semplici, organizzando quelle conosciute in base alle loro proprietà fisiche e chimiche. Se formalmente la nascita del sistema periodico viene attribuita a Mendeleev, ciò dipende dal fatto che egli non si limitò a classificare gli elementi conosciuti verso la fine del diciannovesimo secolo, ma propose un «modello di periodicità» fondato su due evidenze derivabili da manipolazioni macroscopiche: il peso atomico e la capacità combinatoria degli elementi.

È nostra intenzione "tornare sui passi di Mendeleev" e riesaminare - in chiave storico-epistemologica – i criteri che hanno portato alla costruzione del Sistema Periodico, ragionando di elementi, sostanze semplici, reattività delle sostanze e dei problemi inerenti la classificazione degli elementi stessi. Obiettivo di questo intervento sarà evidenziare il ruolo giocato dai rapporti tra i livelli macroscopico, microscopico e formale nel processo di classificazione degli elementi e discuterne le implicazioni didattiche. Infatti, poiché la questione della periodicità è stata affrontata storicamente a partire da evidenze macroscopiche ben prima che la comunità chimica elaborasse modelli di strutture atomiche e configurazioni elettroniche, appare utile discutere criticamente la diffusa tendenza ad affrontare le proprietà periodiche sul piano didattico, focalizzandosi sui soli aspetti microscopici e sopravvalutando il ruolo della struttura elettronica come criterio classificatorio. Pur riconoscendo la potenza esplicativa dei modelli microscopici, il livello macroscopico resta infatti il livello "operativo" del chimico, nel quale emergono proprietà non interamente deducibili dal microscopico. Questo problema pertiene al dibattito sulla riducibilità o meno della chimica alla quanto-meccanica.

Attraverso lavori individuali e di gruppo, si cercherà di discutere e mettere a fuoco i criteri di classificazione degli elementi chimici ed evidenziare il fatto che nella tessera di ciascun elemento delle moderne Tavole Periodiche sono contenute informazioni che pertengono a registri concettuali differenti – macro, micro e formale.

Si giungerà infine a discutere le problematiche sollevate dalla individuazione degli elementi più pesanti e instabili, che non esistono nella forma delle rispettive sostanze semplici. In che misura e a quale livello essi rientrano nei criteri classificatori sui quali si fonda la Tavola Periodica? Quali problemi essi sollevano, rispetto all'uso della Tavola Periodica non soltanto come strumento classificatorio, ma anche predittivo?



Riflessioni sulle proprietà predittive della Legge di Periodicità

Roberto Zingales Dipartimento di Fisica e Chimica Università di Palermo roberto.zingales@unipa.it

Quando, nel 1869, Mendeleév illustrò ai membri della Società Chimica Russa la legge naturale che regola il ripetersi periodico delle proprietà degli elementi, e la Tabella Periodica che ne costituisce la sintesi, i chimici l'accolsero immediatamente e unanimemente come il punto di arrivo del lungo processo, iniziato dagli alchimisti arabi, di ricerca di un criterio di classificazione degli oggetti chimici, che aveva ricevuto nuovo impulso dopo la pubblicazione del sistema di classificazione botanico di Linneo.

Non fu, però, altrettanto chiaro, o non fu apprezzato abbastanza, il forte potere predittivo che la tabella aveva in sé: fu lo stesso Mendeleév a sottolineare come una legge naturale, se e in quanto valida, dovesse consentire allo scienziato, non solo di organizzare il materiale già noto, ma anche di formulare previsioni su quanto avrebbe dovuto essere ancora scoperto. E ritenne di doversi impegnare nel formulare le previsioni, perché, solo in questo modo, avrebbe potuto raccogliere nuove prove sperimentali a sostegno della correttezza e della universalità della legge di periodicità.

Le previsioni riguardavano, soprattutto tre aspetti:

- 1) l'esistenza di elementi non ancora identificati;
- 2) il posto da assegnare loro nel sistema generale e il valore di alcuni loro parametri fisici e chimici caratteristici, primi fra tutti, peso atomico e valenza;
- 3) il posto occupato in Natura da guesti elementi.

Non tutte le sue previsioni, però, si rivelarono corrette: in questa discussione, si cercherà di analizzare le diverse previsioni, individuare su quali fondamenti sperimentali o concettuali esse si basassero, e stabilire infine le relazioni di reciproca dipendenza tra la legge di periodicità e lo sviluppo della Chimica negli anni successivi.



Una nuova prospettiva per il concetto di orbitale. Confronto con le usuali impostazioni

Giovanni Villani Istituto di Chimica dei Composti OrganoMetallici (ICCOM – UOS Pisa) Consiglio Nazionale delle Ricerche villani@pi.iccom.cnt.it

Il concetto quantistico di orbitale è fondamentale sia in ambito di ricerca sia in didattica. Esso, in particolare, viene insegnato in vari ordini di scuola, ma qui ci concentreremo solamente sul suo insegnamento al primo anno di università (non verrà fatta alcuna differenza tra i diversi corsi di studio).

Un primo aspetto da chiarire è in che senso intendere l'aggettivo "quantistico". Esso è sicuramente collegato alla quantizzazione dell'energia e, quindi, ad un valore ben definito dell'energia orbitalica, ma anche altre conseguenze quantistiche sono importanti per questo concetto e vanno messe in evidenza. La principale di queste è l'unitarietà del concetto di orbitale. A differenza del corrispondente concetto classico di orbita (si ricordi che, storicamente, il termine "orbitale" viene da "orbita"), in cui ogni punto rappresenta uno stato ad un certo tempo del sistema e, quindi, l'orbita può essere decomposta in infiniti stati a tempi diversi, l'orbitale non può essere "suddiviso" in concetti quantistici più semplici, e "tutto insieme" rappresenta un possibile "modo di essere", un possibile stato di una coppia di elettroni, mentre lo spin-orbitale rappresenta lo stato, reale o possibile (virtuale), di un elettrone.

Delle differenti definizioni di orbitale (zona di spazio con una data probabilità di trovare l'elettrone, funzione matematica, ecc.) noi si è scelta la definizione di orbitale che appare più coerente con la meccanica quantistica: quella che lo lega direttamente al concetto di stato. Questa definizione pone dei grossi problemi didattici, come, ad esempio, le domande: Come si caratterizza questo stato? Che rapporto ha con la funzione d'onda (altro concetto quantistico)? Vi sono, poi, altri problemi didattici connessi. Vediamone due: la forma dell'orbitale e la configurazione elettronica di un atomo. Se l'orbitale è uno stato, esso è un concetto scientifico astratto che non ha una sua forma. Per esempio, per lo stato termodinamico di un sistema a temperatura e volume fissati non ha senso chiedersi: Che forma ha lo stato di questo corpo? In tutti i libri didattici (e non solo) che trattano la meccanica quantistica, tuttavia, sono riportare forme, più o meno semplici, per ogni orbitale. Che significato hanno allora quelle figure? Un secondo problema è costituito dal "riempimento" degli orbitali con gli elettroni. Un concetto immateriale (l'orbitale) non può essere riempito con un oggetto materiale come l'elettrone. Che senso dobbiamo, quindi, attribuire alla configurazione elettronica degli elementi, dove i singoli orbitali vengono riempiti con gli elettroni secondo un ordine energetico? Che senso hanno gli orbitali ibridi? e quelli molecolari?

Esiste, poi, il problema della "realtà" dell'orbitale, con l'annesso problema della "visibilità". In quest'ottica è evidente che un concetto astratto non può essere "visto", mentre possono essere "viste" (messe in evidenza con particolari tecniche) le sue caratteristiche, per esempio la sua proprietà "energia".

In conclusione, la definizione di orbitale come stato ci porta a riorganizzare una serie di concetti scientifici e didattici fondamentali e a chiarire i fondamenti quantomeccanici della chimica.



Esistono evidenze sperimentali sulla configurazione elettronica degli atomi?

Antonella Rossi Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Cittadella Universitaria di Monserrato, S.S. 554 – bivio per Sestu, 09042, Monserrato (CA), Università degli Studi di Cagliari

Italia
e-mail: rossi@unica.it

web site: http://dipcia.unica.it/superf/

Dopo che negli anni '20 del secolo scorso era stato introdotto il concetto di quanto di energia, era importante lo sviluppo di modelli matematici che potessero permettere il calcolo dell'energia degli elettroni, e la messa a punto di esperimenti che permettessero la misura dell'energia elettronica. L'energia di ionizzazione (potenziale di ionizzazione), ossia l'energia necessaria per rimuovere un elettrone da un atomo, era l'energia che chimici e fisici si proponevano di misurare. Tra le tecniche disponibili c'erano le curve di efficienza di ionizzazione: questo metodo forniva informazioni, seppure con difficoltà anche pratiche, solo sull'energia degli elettroni meno legati al nucleo. Un altro metodo era di ionizzare gli atomi utilizzando un fascio di raggi X: $M + hv \rightarrow M^+ + e^-$

Fu subito dimostrato che l'energia cinetica dell'elettrone emesso, chiamato anche fotoelettrone, dipende solamente dalla frequenza della radiazione incidente e non dalla sua intensità. L'equazione che correla l'energia del fotone incidente, h

con l'energia cinetica (KE) dell'elettrone emesso permette di risalire all'energia di legame (BE) dell'elettrone è: BE = hv - KE.

Questi esperimenti sono possibili grazie ai progressi nella produzione di analizzatori che permettono la misura dell'energia cinetica dei fotoelettroni e alla produzione di camere di ultra-alto vuoto. Ogni linea degli spettri elettronici indotti dall'interazione radiazione X – materia, corrisponde a una precisa energia di legame dell'elettrone nella struttura elettronica di un dato atomo. Quando gli atomi sono legati in una molecola o sono in un solido, lo spettro elettronico cambia e, dunque, dalla registrazione degli spettri (grazie alla misura dell'energia di legame) si può risalire a variazioni di legame chimico e di distribuzione di carica in una molecola.

Oltre alle numerose applicazioni di tipo analitico è possibile utilizzare questo effetto per fornire una prova sperimentale della configurazione elettronica degli atomi. La spettroscopia che si basa su questo effetto è nota come spettroscopia elettronica per l'analisi chimica (l'acronimo è ESCA dall'Inglese Electron Spectroscopy for Chemical Analysis). Nella prima parte della presentazione saranno introdotti il principio fisico della spettroscopia e la strumentazione necessaria. Nella seconda parte saranno presentati gli spettri elettronici dei gas nobili e saranno forniti i risultati delle energie orbitaliche calcolate mediante la teoria di Hartree-Fock e le sue successive modificazioni. Nella terza parte saranno messi a disposizione gli spettri di elementi di transizione e saranno confrontati e discussi i risultati ottenuti.