

La Meccanica Quantistica: alcuni esempi

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Caso di una particella libera di massa m (caso unidimensionale)

La sua energia potenziale è nulla

Quale sarà la sua equazione agli autovalori?

$$E_T = E_{cin} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (56)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0$$

Quest'equazione che tipo di soluzioni ammette?

$$\psi_1(x) = A \cos(kx)$$

$$\psi_2(x) = B \sin(kx)$$

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

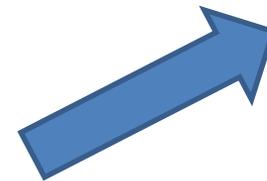
Esempio 1

$$\psi_1(x) = A \cos(kx)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Ak^2 \cos(kx) + EA \cos(kx) = 0$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2m_e E} \\ p &= \frac{hk}{2\pi} \Rightarrow k = \frac{p}{\hbar} \\ \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \end{aligned}$$

(57)

In perfetto accordo con la lunghezza d'onda ricavata da de Broglie (34)

Solo che qui ci siamo arrivati senza alcuna considerazione a priori, ma utilizzando il formalismo della meccanica quantistica

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Più in generale, possiamo affermare che l'integrale generale in questo esempio specifico è della forma:

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad (58)$$

Il che vuol dire che **l'equazione d'onda di una particella libera è rappresentata da un'onda piana ad ampiezza costante in tutto lo spazio.**

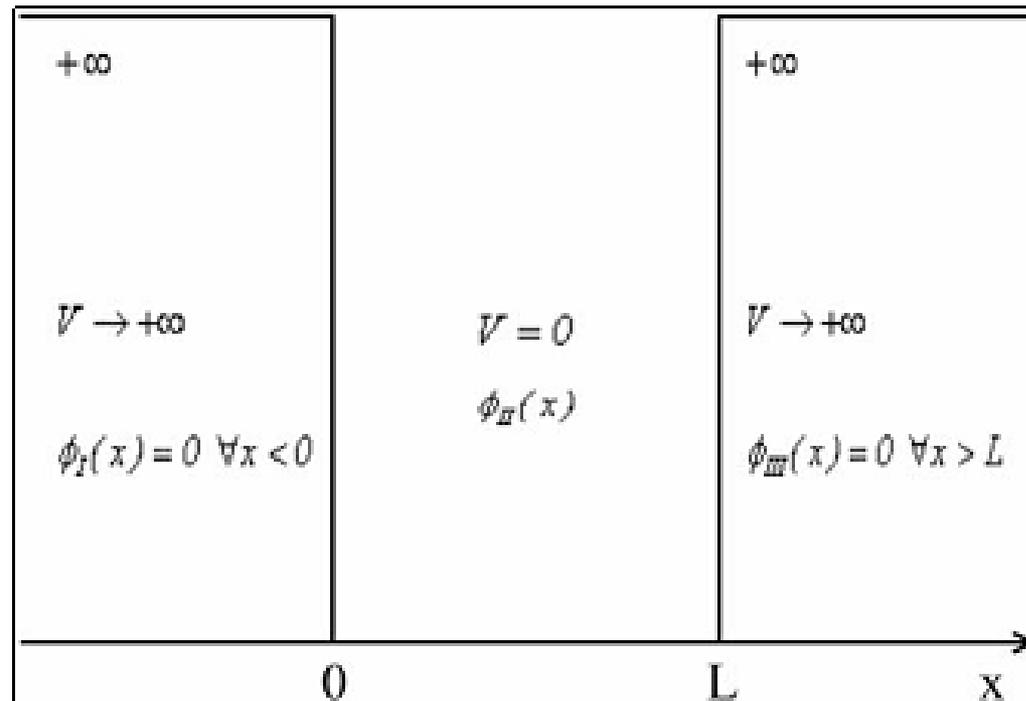
Inoltre, avendo detto che tale funzione d'onda è una funzione complessa, ponendo $A=1$ e $B=i$

$$\psi(x) = \cos(kx) + i \sin(kx) = e^{ikx} \quad (59)$$

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Caso di una particella confinata.

Consideriamo ora il caso di una “particella in una scatola”, ovvero quello di una particella di massa m confinata in una “buca di potenziale” di larghezza L e di pareti di potenziale infinitamente alte.



Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Facciamo alcune considerazioni:

- Il potenziale è infinito per $x \leq 0$ e per $x \geq L$
- Il potenziale è nullo per $0 < x < L$

Cosa significa questo?

Ragionevolmente la funzione d'onda al di fuori di tale intervallo è nulla!

Probabilità di trovare la particella al di fuori della buca è nulla!

All'interno della buca la particella si comporta come una particella libera, non è soggetta ad alcuna forza.

Abbiamo però delle condizioni al contorno

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

L'integrale dell'equazione ovvero la funzione d'onda all'interno della buca avrà sempre soluzione:

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow A \cos(0) = 0 \Rightarrow A = 0$$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow B \sin(kL) = 0$$

$$kL = n\pi$$

$B=0$ soluzione non accettabile

Dalla (57)

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} L = n\pi \tag{60}$$

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 = E_0 n^2 \quad (61)$$

E_n è l'energia della particella confinata nella buca

Da tale relazione si può evincere che:

in una buca di potenziale avente spessore L una particella **non può assumere tutti i valori di energia, ma solo valori discreti**

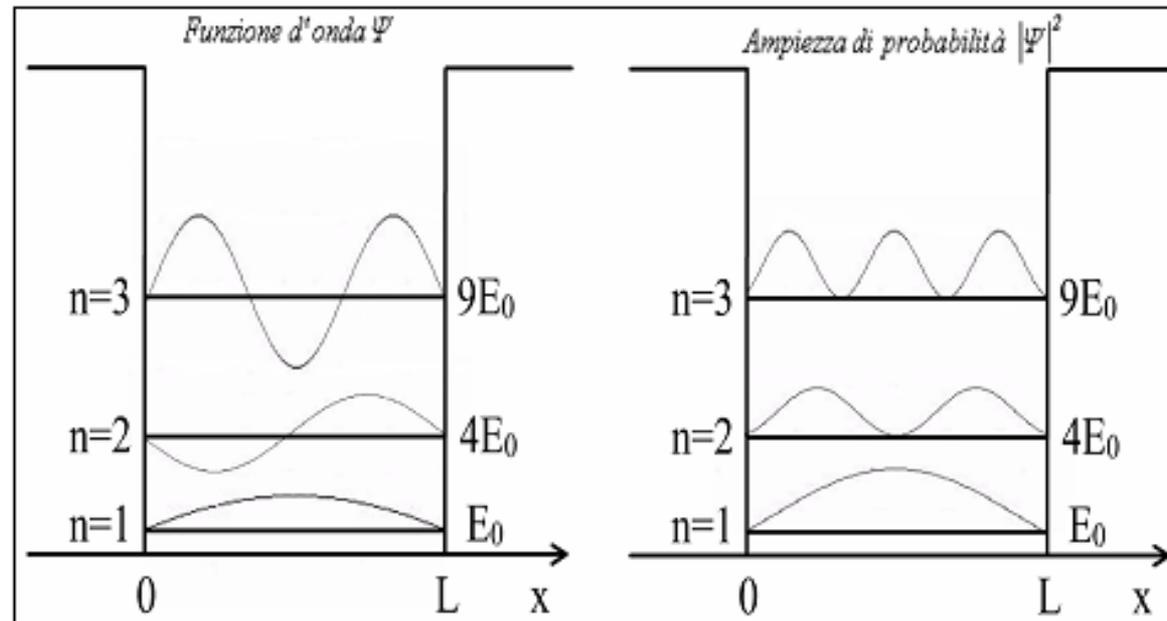
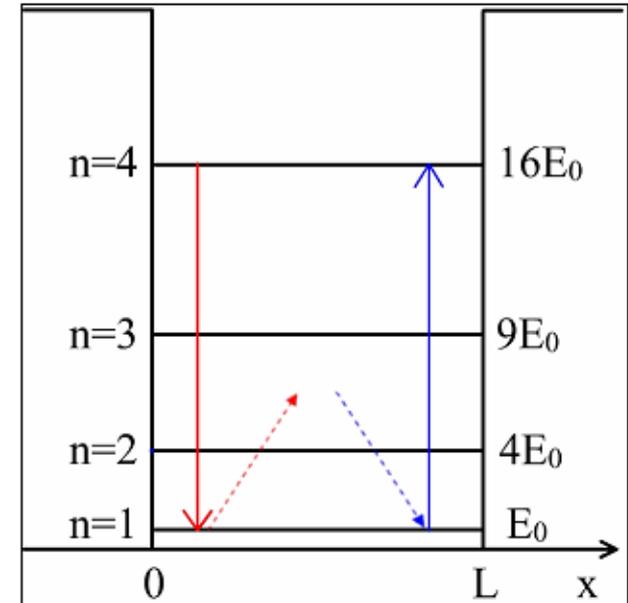
Si è giunti, **senza alcuna assunzione ad hoc**, ma semplicemente **tramite lo schema concettuale della meccanica quantistica**, ad una condizione di **DISCRETIZZAZIONE DELLO SPETTRO DI ENERGIE DI UN SISTEMA FISICO.**

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

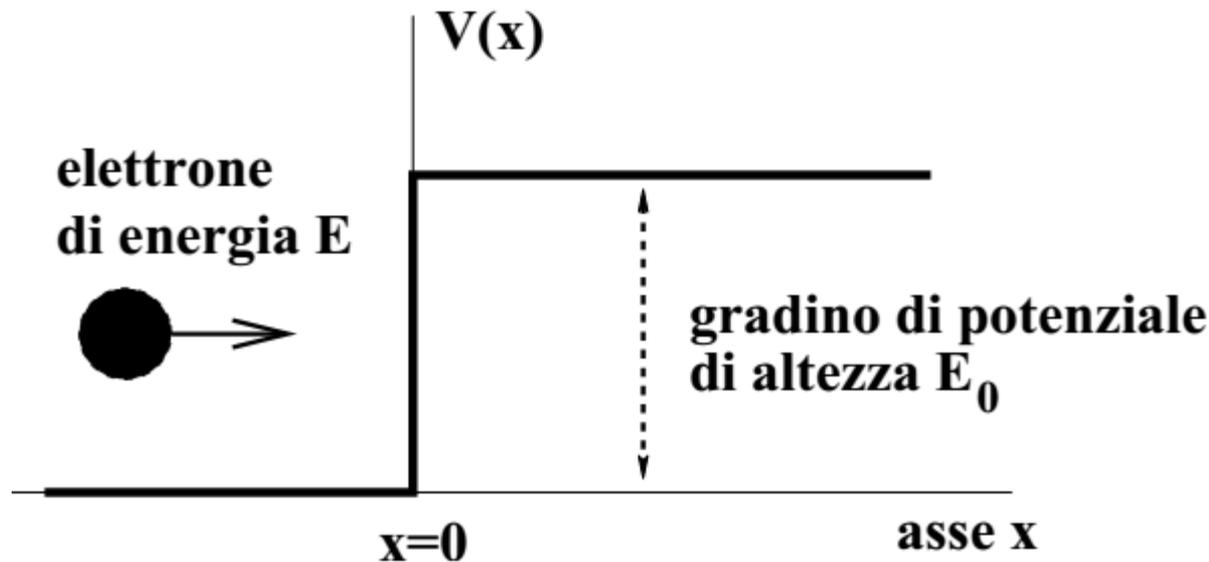
$$\psi(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_n}} = \frac{2L}{n}$$



Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Consideriamo il caso di un elettrone libero che si muove verso un gradino di potenziale



Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Distinguiamo due casi

1) $E < E_0$

2) $E > E_0$

Scriviamo l'equazione di Schroedinger associata al problema

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

$$V(x) = 0 \quad \text{se } x < 0$$

$$V(x) = E_0 \quad \text{se } x \geq 0$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Caso 1 $E < E_0$

Per $x < 0$ la particella si propaga come una particella libera alla quale può sovrapporsi un'onda riflessa, abbiamo che la soluzione dovrà essere del tipo:

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Per $x \geq 0$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + E_0 \right] \psi_2(x) = E \psi_2(x)$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_0) \right] \psi_2(x) = 0$$

$$E - E_0 < 0$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Poniamo:

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_0) = -\alpha^2$$

α è un numero reale
positivo

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) - \alpha^2 \psi_2(x) = 0$$

$$\psi_2(x) = C e^{\pm \alpha x}$$

accettabile

$$\psi_2(x) = C e^{-\alpha x}$$

$$\alpha = \sqrt{-\frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_0)}$$

Probabilità non nulla di trovare l'elettrone a destra del gradino!

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Imponiamo ora le condizioni di raccordo sia sulla funzione d'onda che sulla sua derivata prima

Per $E < E_0$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

Otteniamo il seguente sistema:

$$\begin{cases} A + B = C \\ ikA - ikB = -\alpha C \end{cases}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

$$B = \frac{(ik + \alpha)A}{ik - \alpha}$$

$$C = \frac{2ik\alpha A}{ik - \alpha}$$

$$\psi_1(x) = A \left[e^{ikx} + \frac{(ik + \alpha)}{ik - \alpha} e^{-ikx} \right]$$

$$\psi_2(x) = \frac{2ikA}{ik - \alpha} e^{-\alpha x}$$

La probabilità che l'elettrone oltrepassi il gradino è data da $|\Psi|^2$

$$|\psi_2|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

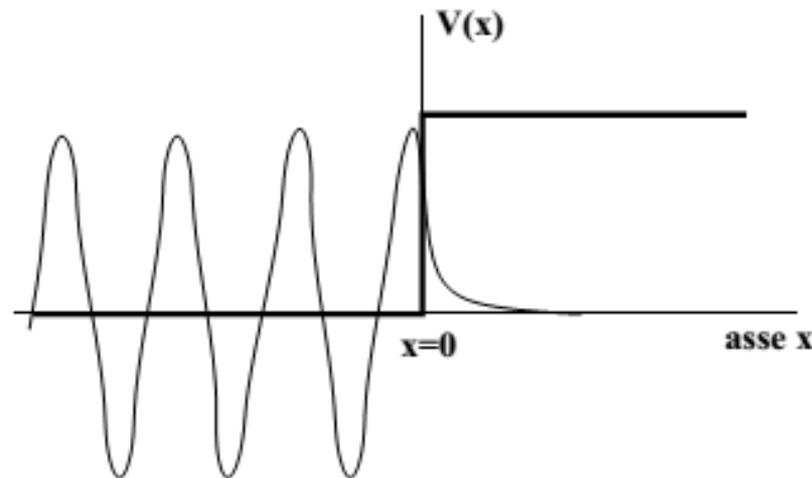
Secondo le leggi della meccanica quantistica

Esiste una probabilità non nulla che l'elettrone attraversi il gradino di potenziale

La funzione d'onda trasmessa tende a decrescere allontanandosi da $x=0$, e all'aumentare di α

Per $E_0 = \infty$ l'onda trasmessa è nulla

$$|\psi_2|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$$



Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Caso $E > E_0$

Per $x < 0$ la trattazione è identica

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Per $x \geq 0$ l'equazione diventa

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + \beta^2 \psi_2(x) = 0$$

$$\beta^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_0)$$

β è un numero reale positivo

$$\psi_2(x) = Ce^{i\beta x}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Imponiamo ora le condizioni di raccordo sia sulla funzione d'onda che sulla sua derivata prima

Per $E > E_0$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

Otteniamo:

$$B = \frac{(k - \beta)A}{k + \beta}$$

$$C = \frac{2kA}{k + \beta}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

$$\psi_1(x) = A \left[e^{ikx} + \frac{k - \beta}{k + \beta} e^{-ikx} \right]$$

$$\psi_2(x) = \frac{2kA}{k + \beta} e^{i\beta x}$$

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \left[\frac{k - \beta}{k + \beta} \right]^2$$

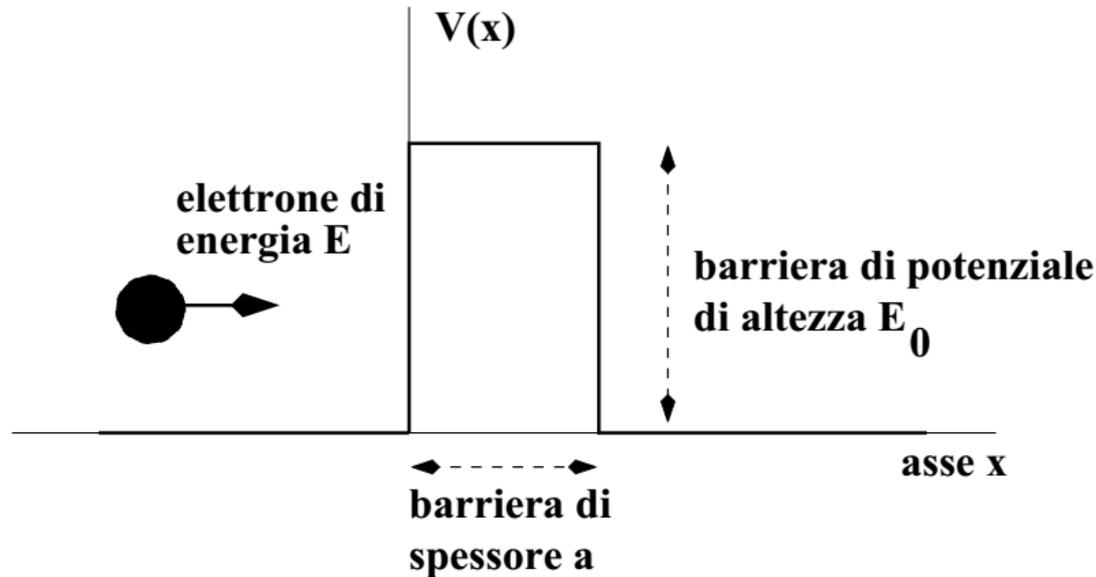
Consideriamo il coefficiente di riflessione

$$T = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2} = \frac{\beta}{k} \left[\frac{2k}{k + \beta} \right]^2$$

Secondo le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che l'elettrone venga riflesso dal gradino di potenziale, anche se la sua energia è maggiore³⁶

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Consideriamo il caso di un elettrone libero che incontra una barriera di potenziale come quella in figura



Ancora una volta, l'equazione associata è:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

In questo caso

$$V(x) = 0 \quad x < 0$$

$$V(x) = E_0 \quad 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = 0 \quad x > a$$

Caso $E < E_0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_2x} + Ge^{-ik_2x}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}}$$

$$\alpha = \sqrt{-\frac{2m_e (E - E_0)}{\hbar^2}}$$

La componente $+ix$ esiste perché in questo caso la barriera è di larghezza finita, al contrario del caso precedente

Si può però dimostrare che $C \ll D \rightarrow$ solo smorzamento

Inoltre non ho particelle che vengono da destra $\rightarrow G=0$

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Facciamo alcune considerazioni

La componente $+αx$ (all'interno della barriera) esiste perché in questo caso **la barriera è di larghezza finita**, al contrario del caso precedente.

La soluzione per $x > a$ ha un'ampiezza F inferiore ad A perché vi sarà **in parte riflessione** dell'onda incidente e **in parte smorzamento** all'interno della barriera

Anche in questo caso posso ricavarmi i valori delle costanti imponendo le condizioni di raccordo

Meccanica Quantistica: Effetto Tunnel

Dobbiamo capire se è possibile che una particella fuoriesca dal gradino di potenziale

A noi in realtà interessa determinare A ed F e il loro rapporto e vedere che il coefficiente di trasmissione è maggiore di 1 e che aumenta a diminuire dello spessore della barriera

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

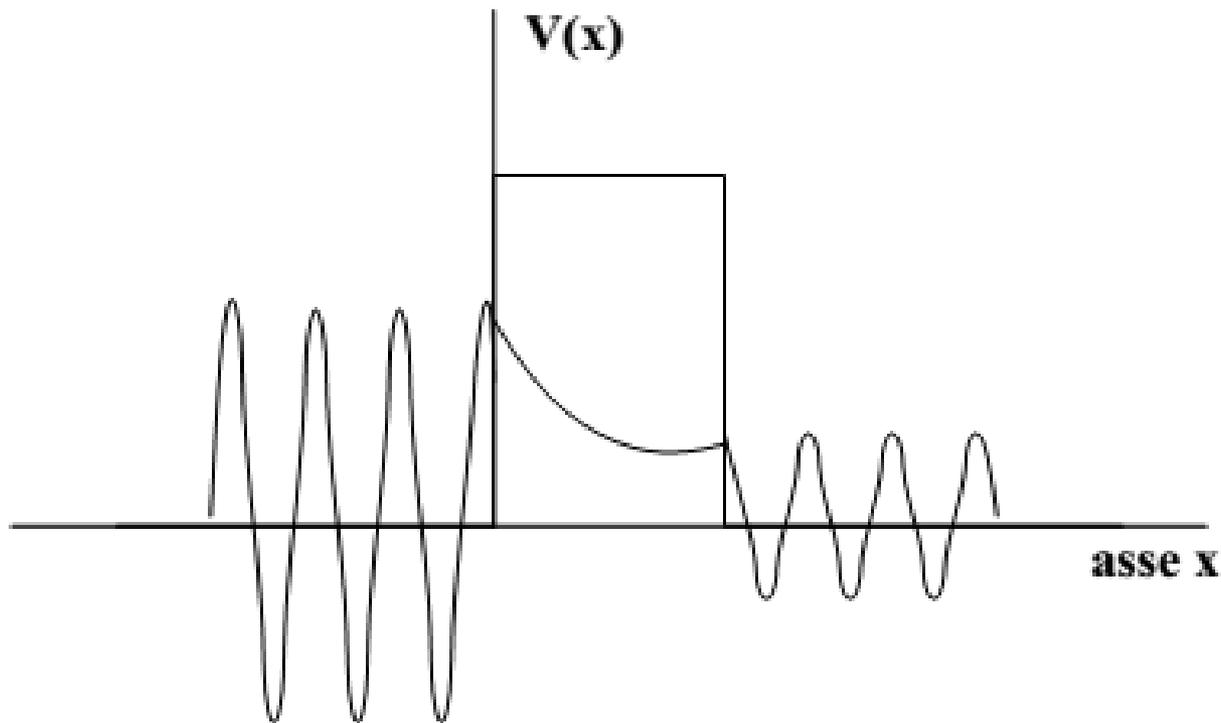
$$\frac{F}{A} = \frac{4ik\alpha e^{-2ika}}{(\alpha + ik)^2 e^{-2\alpha a} - (\alpha - ik)^2 e^{2\alpha a}} \approx \frac{4ik\alpha e^{-2ika}}{(\alpha + ik)^2} e^{-2\alpha a}$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \approx \left[\frac{4\alpha k}{\alpha^2 + k^2} \right] e^{-4\alpha a}$$

Meccanica Quantistica: Effetto Tunnel

Secondo le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che un elettrone (qualsiasi particella materiale) con energia inferiore alla barriera di potenziale, possa superare tale barriera

EFFETTO TUNNEL



Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Caso $E > E_0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{i\beta x} + De^{-i\beta x}$$

$$\psi_3(x) = Ee^{ikx}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}}$$

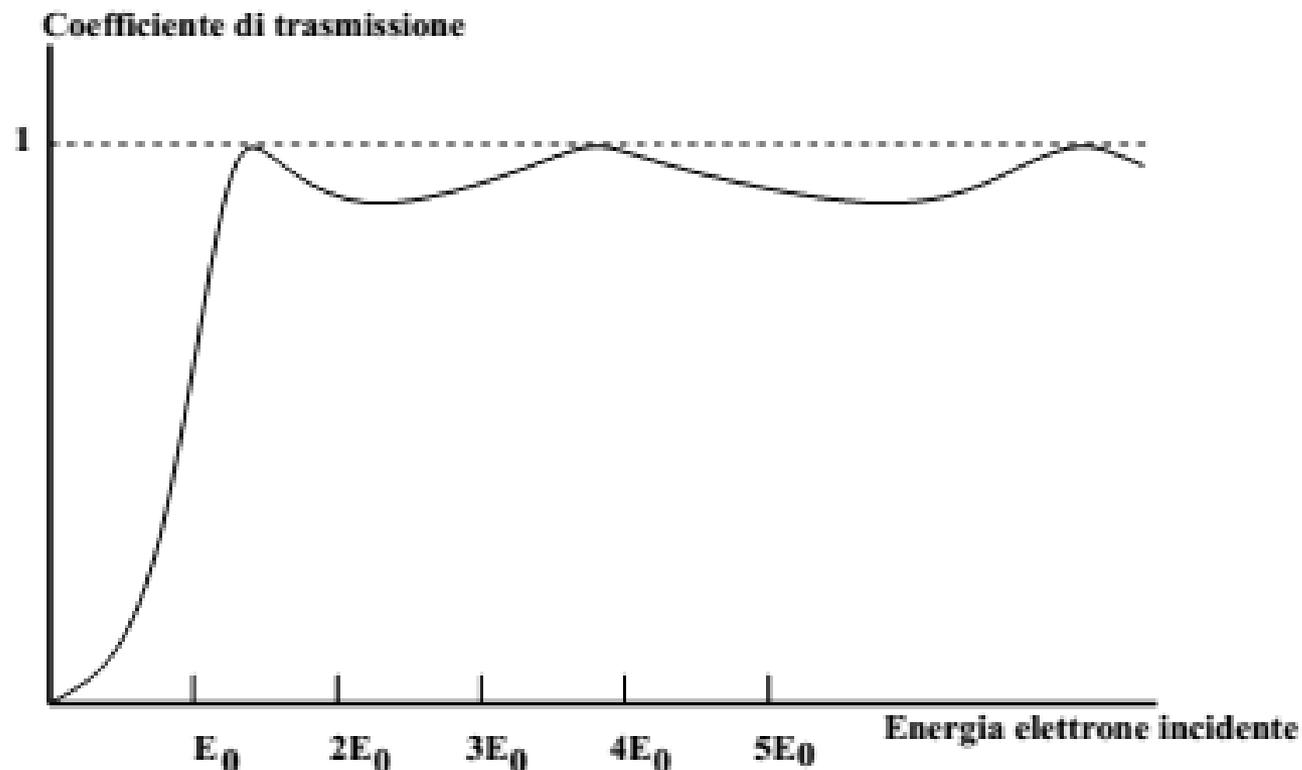
$$\beta = \sqrt{\frac{2m_e (E - E_0)}{\hbar^2}}$$

Per le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che l'onda venga riflessa dalla barriera di potenziale

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Anche in questo caso, imponendo le condizioni al contorno posso ricavarmi i coefficienti A ed F e calcolare il coefficiente di trasmissione $T=F/A$

Esistono dei valori di F dell'elettrone incidente per i quali la barriera è trasparente!



La Meccanica Quantistica

Applicazione all'atomo di idrogeno

L'atomo di idrogeno

L'equazione di Schroedinger applicata a questo caso da come risultato quanto anticipato da Bohr, rinforzandone però l'aspetto concettuale.

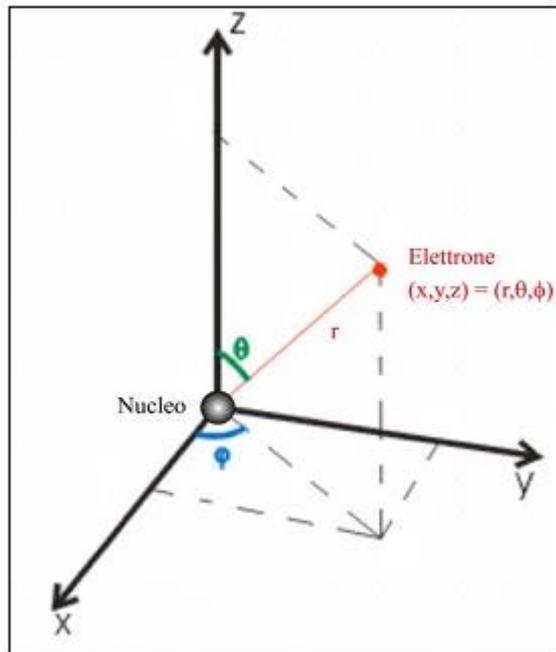
La discretizzazione dell'energia non è più un'ipotesi “utile a far tornare i conti”, ma discende da un'equazione generale, che vale in qualunque sistema, e che dunque unifica le diverse problematiche di tutti i possibili sistemi sotto un'unica metodologia di soluzione.

Determiniamo ora l'equazione di Schroedinger per l'atomo di idrogeno

L'atomo di idrogeno

Ipotizziamo:

- nucleo abbia massa infinita
- Centrato rispetto al sistema di riferimento cartesiano



Dobbiamo determinare l'energia totale del sistema:

$$E_T = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \Rightarrow H$$

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

r è il raggio vettore che individua la posizione dell'elettrone

L'atomo di idrogeno

La risoluzione di tale equazione non è immediata

Come prima cosa consideriamo che un elettrone che ruota attorno al nucleo è un **problema a simmetria sferica**

Possiamo passare a coordinate radiali o polari

$$\Psi(x, y, z) \rightarrow \Psi(r, \theta, \varphi)$$

In una situazione di questo tipo, si può dimostrare (noi non lo faremo), che parte radiale e parte angolare possono essere separate e trattate separatamente

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Definiremo in seguito il significato di questa terna di numeri

L'atomo di idrogeno

L'equazione di Schroedinger si sdoppia in due equazioni più semplici. L'autovalore dell'energia (soluzione dell'equazione di Schroedinger radiale) risulta essere:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (62)$$

Notiamo che è la stessa espressione ottenuta dal modello di Bohr!

Ma qui è ottenuta non supponendo arbitrariamente che l'energia sia quantizzata, ma come conseguenza dell'equazione di Schroedinger che è assolutamente generale e tiene conto del vero potenziale applicabile in questo caso.

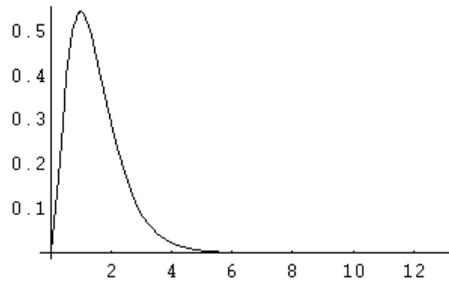
L'atomo di idrogeno

Definiamo i due numeri interi, n (numero quantico principale, che assume i valori $n = 1, 2, 3, \dots$) ed l (numero quantico secondario o angolare, che assume i valori $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$).

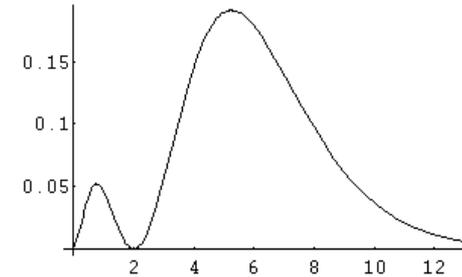
Per lo stato fondamentale dell'idrogeno ($n = 1$), si avrà un solo valore di l , con un'energia pari a -13.6 eV

Per il primo stato eccitato ($n = 2$) i valori di l divengono due ($l = 0$ ed $l = 1$), ai quali corrisponde tuttavia **un unico livello di energia** (in quanto E_n dipende **unicamente da n**): in tal caso si parlerà di **livelli energetici degeneri**, che, non rappresentano lo stesso sistema fisico, in quanto **rappresentati da funzioni d'onda diverse**.

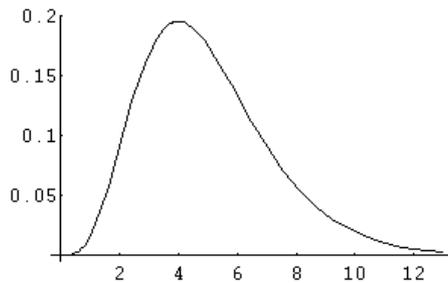
L'atomo di idrogeno



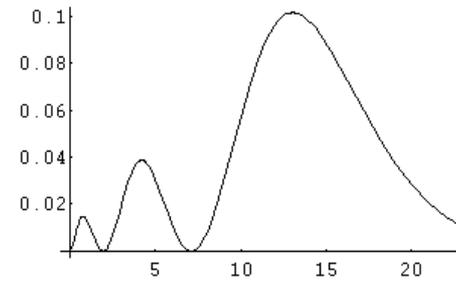
Stato 1s,
 $n=1, l=0$



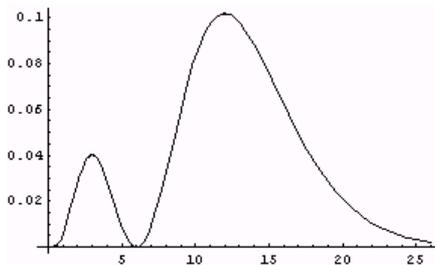
Stato 2s,
 $n=2, l=0$



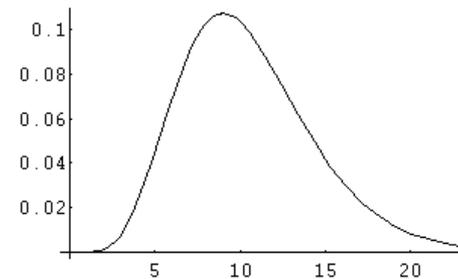
Stato 2p,
 $n=2, l=1$



Stato 3s,
 $n=3, l=0$



Stato 3p,
 $n=3, l=1$



Stato 3d,
 $n=3, l=2$

L'atomo di idrogeno

Come si vede, stati con lo stesso n ma diverso l , corrispondono a funzioni d'onda differenti e a probabilità di presenza differenti.

Più è grande n , più è probabile trovare l'elettrone lontano dal nucleo, con energie via via più basse.

Gli elettroni che stanno in stati caratterizzati da alti n , stanno lontani dal nucleo e sono ad esso debolmente legati.

La parte angolare della funzione d'onda invece risulta essere (non lo dimostriamo) l'autofunzione dell'operatore Momento Angolare (L).

L'atomo di idrogeno

Y dipende da due numeri quantici, l (già visto) e $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ (momento quantico magnetico o azimutale, autovalore dell'operatore L_z , componente z del vettore L).

Un'importante risultato di questa analisi è che:

Fissato n , abbiamo un solo valore possibile dell'energia, ma n valori possibili di l e $2l+1$ valori possibili di m .

A questi va aggiunto un ultimo numero quantico, detto di spin, che può avere 2 valori possibili $+1/2$ e $-1/2$.

L'atomo di idrogeno

Classificazione dei diversi stati (Orbitali o funzioni orbitaliche)

$l=0 \rightarrow$ stati di tipo s ($m=2l+1=1$) Numero di orbitali di tipo s

$l=1 \rightarrow$ stati di tipo p $\rightarrow m=3$ Numero di orbitali di tipo p

$l=2 \rightarrow$ stati di tipo d $\rightarrow m=5$ Numero di orbitali di tipo d

$l=3 \rightarrow$ stati di tipo f $\rightarrow m=7$ Numero di orbitali di tipo f

L'atomo di idrogeno

Riassumendo:

- n mi definisce l'energia associata (shell)
- l definisce la tipologia e geometria dell'orbitale (s, p, d, f)
- m la sua collocazione spaziale: 1 solo orbitale s, 3 orbitali p, 5 orbitali d, 7 orbitali f
- s definisce lo spin

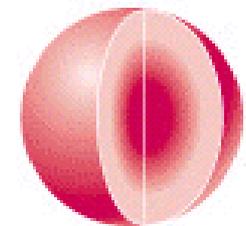
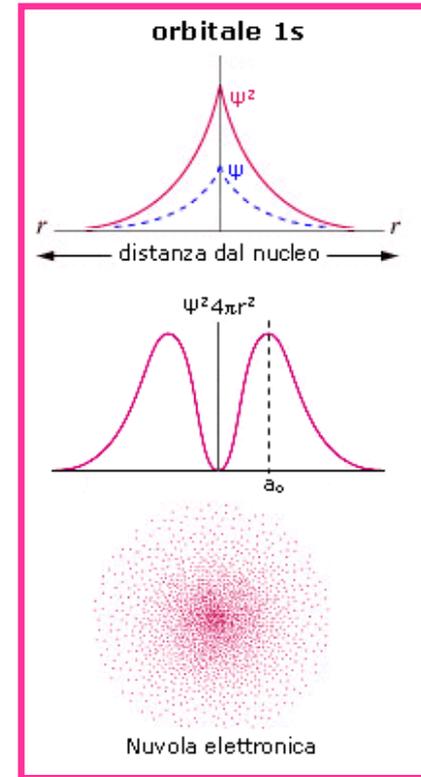
Gli orbitali atomici

Le funzioni d'onda $\Psi(s)$ sono **sfericamente simmetriche**. **La probabilità di trovare l'elettrone è la stessa in tutte le direzioni**, variando solo con la distanza dal nucleo.

Osservando **la funzione orbitalica $\Psi(s)$** in dipendenza dal raggio si osserva che essa presenta un **valore finito in coincidenza del nucleo**, mentre **tende a zero per $r \rightarrow \infty$** .

L'orbitale 1s è infinitamente esteso (tutti gli orbitali lo sono)

L'andamento della funzione densità di probabilità $\Psi(s)^2$ è massima al centro

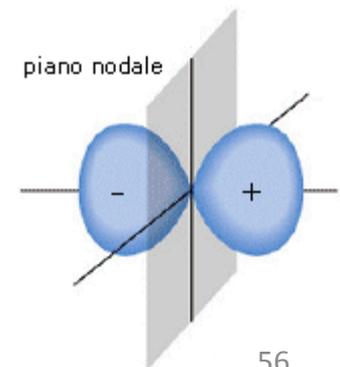
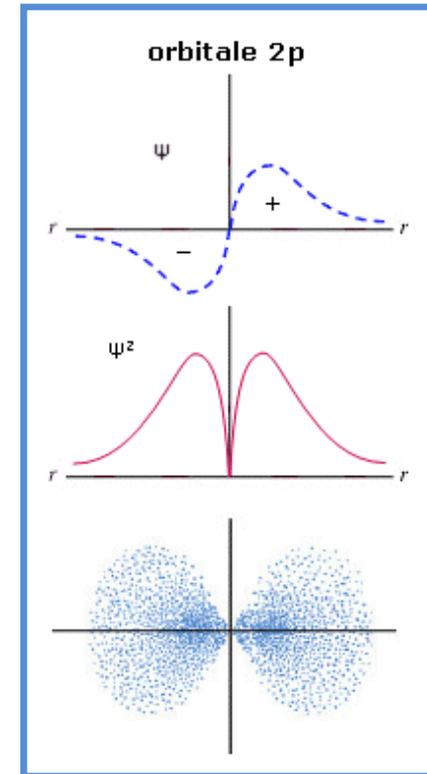
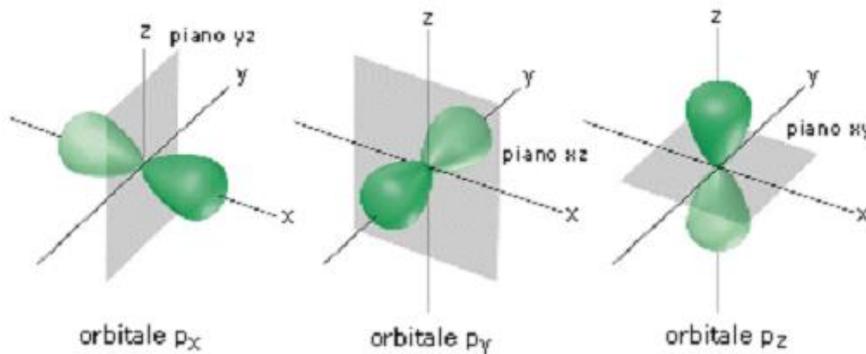


Gli orbitali atomici

Gli orbitali **p** hanno **simmetria cilindrica**, possiedono cioè un asse preferenziale.

Sono costituiti **da due lobi** ad elevata densità elettronica (in cui la funzione d'onda Ψ assume segno opposto) ed un **piano nodale** nell'origine (nucleo)

Sono **tre per livello energetico** (tranne il primo) ed essendo orientati uno perpendicolarmente all'altro nella direzione dei tre assi cartesiani, vengono indicati con la notazione: p_x , p_y , p_z



L'atomo di idrogeno

Tale numero è stato introdotto per giustificare un'ulteriore degenerazione osservata con un opportuno esperimento (Stern e Gerlach, 1924).

Da un punto di vista intuitivo questo corrisponde al fatto che **l'elettrone oltre che muoversi intorno al nucleo può anche girare su se stesso e può farlo in senso orario oppure in senso antiorario.**

Quindi la descrizione dello stato fisico dell'elettrone è realizzata mediante 4 variabili, r , θ , φ e lo spin χ .

L'atomo di idrogeno

Una importante conseguenza matematica di questa complessità è che **due elettroni distinti non possono essere descritti dallo stesso stato quantico, ovvero dalla stessa quadrupla (n, l, m, s) .**

Questo costituisce il cosiddetto **principio di esclusione di Pauli.**

Al massimo, fissato la tripla n, l, m , si possono avere 2 diversi stati quantici, caratterizzati da un diverso numero di spin.

La tavola periodica degli elementi

1° Livello energetico

1 orbitale s (1s) capienza max: 2 elettroni

2° Livello energetico

1 orbitale s (2s) capienza max: 2 elettroni
3 orbitali p (2p) capienza max: 6 elettroni

3° Livello energetico

1 orbitale s (3s) capienza max: 2 elettroni
3 orbitali p (3p) capienza max: 6 elettroni
5 orbitali d (3d) capienza max: 10 elettroni

4° Livello energetico

1 orbitale s (4s) capienza max: 2 elettroni
3 orbitali p (4p) capienza max: 6 elettroni
5 orbitali d (4d) capienza max: 10 elettroni
7 orbitali f (4f) capienza max: 14 elettroni

I livelli successivi presentano al massimo la struttura orbitalica del quarto livello.

Gli atomi più pesanti, come l'Uranio, hanno elettroni a sufficienza per occupare 7 livelli energetici, senza tuttavia riuscire a riempirli completamente.

Livello	Orbitali consentiti				Capienza elettronica
1°	1s				2
2°	2s	2p			2+6=8
3°	3s	3p	3d		2+6+10=18
4°	4s	4p	4d	4f	2+6+10+14=32
5°	5s	5p	5d	5f	"
6°	6s	6p	6d		"
7°	7s				"

La tavola periodica degli elementi

La struttura di un atomo che ha Z protoni e Z elettroni si costruisce rispettando il principio di Pauli.

A partire da $n=1$, si sistemano gli elettroni 2 alla volta (ciascuno con numero di spin diverso) in ciascuno stato quantico definito dalla tripla (n,l,m) .

L'insieme degli stati corrispondenti ad un certo n è detto shell.

Il processo continua fino a che i primi Z livelli a energia più bassa sono riempiti.

Similmente si costruisce la tavola periodica degli elementi.

Configurazione elettronica esterna

Gli elettroni si distribuiscono negli orbitali obbedendo alle cosiddette 3 regole di Aufbau (o regole di costruzione)

1) Principio di minima energia

Gli elettroni occupano sempre l'orbitale vuoto ad energia più bassa.

2) Principio di esclusione di Pauli

Ogni orbitale può contenere **al massimo 2 elettroni** i quali saturano l'orbitale disponendosi con **spin antiparalleli**.

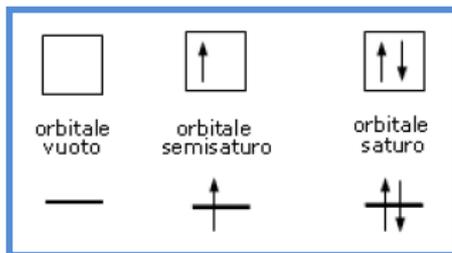
Lo spin (**momento angolare intrinseco**) è una caratteristica vettoriale degli elettroni (gli elettroni si comportano come minuscole trottole che ruotano attorno al proprio asse e quindi possiedono un momento angolare).

Un elettrone può possedere solo due valori di spin (anche lo spin è quantizzato). Gli elettroni negli orbitali vengono rappresentati con delle frecce verticali (che rappresentano il vettore spin)

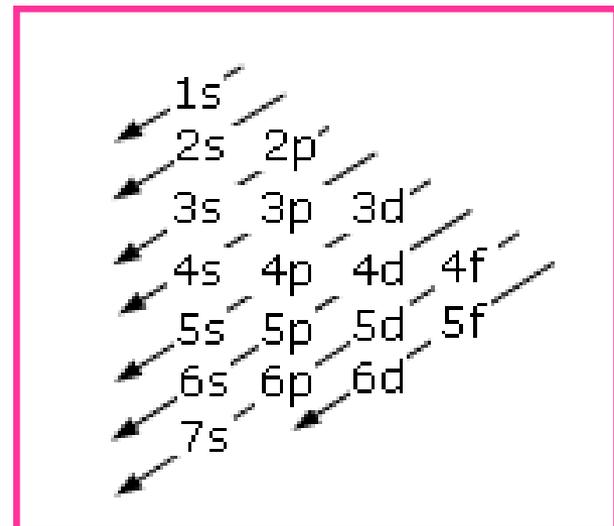
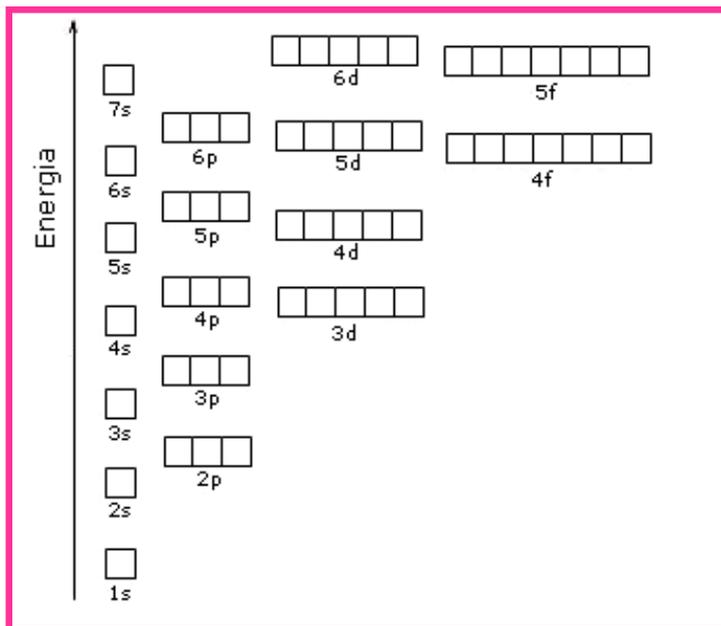
Configurazione elettronica esterna

3) Principio di massima molteplicità di Hund

Gli elettroni si dispongono **negli orbitali degeneri uno per orbitale con spin parallelo** fino a semi-saturarli tutti e, successivamente, li saturano seguendo il principio di esclusione Pauli



se dobbiamo inserire 3 elettroni nei tre orbitali degeneri 2p



La tavola periodica degli elementi

Gli elettroni che stanno più lontani dal nucleo si chiamano *elettroni di valenza* e determinano molte proprietà fisiche degli elementi.

La tavola periodica degli elementi è stata proposta ben prima dell'avvento della meccanica quantistica, sulla base dell'affinità tra le proprietà fisiche dei vari elementi.

La meccanica quantistica ha consentito di giustificare queste affinità con lo stato degli elettroni di valenza.

Atomi con lo stesso numero di elettroni di valenza hanno un comportamento chimico molto simile e nella tavola compaiono sulla stessa colonna.

Sulla stessa riga stanno invece elementi con Z consecutivo.

La tavola periodica degli elementi

La valenza di un elemento è determinata dal numero di elettroni della shell esterna.

Nelle reazioni chimiche l'atomo tende ad acquistare o a perdere elettroni in modo da acquisire una struttura stabile come quella dei gas inerti che hanno la shell esterna completa.

Gli elementi che hanno fino a 4 elettroni di valenza tendono a perderli e a diventare elettropositivi, quelli che ne hanno da 4 a 8 tendono ad acquistarli diventando elettronegativi.

Quelli che ne hanno 4 possono avere entrambi i comportamenti.

La tavola periodica degli elementi

La tavola ha 7 periodi (righe).

Ogni periodo comincia con un elemento che ha 1 elettrone di valenza e termina con un elemento che ha la shell esterna completa.

Perciò il primo periodo comincia con l'idrogeno che ha 1 elettrone nella shell esterna e finisce con l'elio che ne ha 2.

Il secondo inizia con il Litio (shell esterna $2s$) prosegue con Berillio ($2s^2$), B ($2s^2 2p$), Carbonio ($2s^2, 2p^2$).....fino al Neon ($2s^2 2p^6$).

La tavola periodica degli elementi

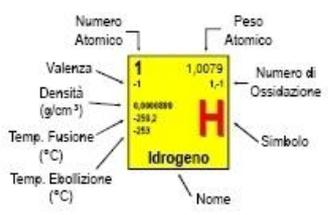
Periodo	1 IA	2 IIA	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9 VIII	10 VIII	11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	1,0079 H Idrogeno																	4,0026 He Elio
2	6,941 Li Litio	9,0122 Be Berillio											10,81 B Boro	12,011 C Carbonio	14,0067 N Azoto	15,9994 O Ossigeno	18,9984 F Fluoro	20,179 Ne Neon
3	22,9898 Na Sodio	24,305 Mg Magnesio											26,9815 Al Alluminio	28,0855 Si Silicio	30,9738 P Fosforo	32,06 S Zolfo	35,453 Cl Cloro	39,948 Ar Argon
4	39,0983 K Potassio	40,08 Ca Calcio	Sc Scandio	Ti Titanio	V Vanadio	Cr Cromo	Mn Manganese	Fe Ferro	Co Cobalto	Ni Nikel	Cu Rame	Zn Zinco	31 Ga Gallio	32 Ge Germanio	33 As Arsenico	34 Se Selenio	35 Br Bromo	36 Kr Kripton
5	85,4678 Rb Rubidio	87,62 Sr Stronzio	Y Ittrio	Zr Zirconio	Nb Niobio	Mo Molibdeno	Tc Tecnecio	Ru Rutenio	Rh Rodio	Pd Palladio	Ag Argento	Cd Cadmio	49 In Indio	50 Sn Stagno	51 Sb Antimonio	52 Te Tellurio	53 I Iodio	54 Xe Xenon
6	132,9054 Cs Cesio	137,33 Ba Bario	La Lantanio	Hf Afnio	Ta Tantalio	W Tungsteno	Re Renio	Os Osmio	Ir Inridio	Pt Platino	Au Oro	Hg Mercurio	81 Tl Tallio	82 Pb Piombo	83 Bi Bismuto	84 Po Polonio	85 At Astatio	86 Rn Radon
7	(223) Fr Francio	226,025 Ra Radio	Ac Attinio	Rf Rutherfordio	Db Dubnio	Sg Seaborgio	Bh Bohrio	Hs Hassio	Mt Meitnerio	Ds Darmstadio	Rg Roentgenio							

- Metalli Alcalini
- Metalli Alcalino-Terrosi
- Lantanidi
- Attinidi
- Elementi di Transizione
- Metalloidi / Non Metalli
- Alogeni
- Gas Nobili



Gruppo

Periodo



6	58 Ce Cerio	59 Pr Praseodimio	60 Nd Neodimio	61 Pm Promezio	62 Sm Samario	63 Eu Europio	64 Gd Gadolinio	65 Tb Terbio	66 Dy Disprozio	67 Ho Olmio	68 Er Erbio	69 Tm Tulio	70 Yb Itterbio	71 Lu Lutezio
7	90 Th Torio	91 Pa Protoattinio	92 U Uranio	93 Np Nettunio	94 Pu Plutonio	95 Am Americio	96 Cm Curio	97 Bk Berchelio	98 Cf Californio	99 Es Einsteinio	100 Fm Fermio	101 Md Mendelevio	102 No Nobelio	103 Lr Laurenzio

Serie dei Lantanidi

Serie degli Attinidi

La tavola periodica degli elementi

1 IA																												18 VIIIA												
1	1,0079 -1 1-1																	4,0026 0																						
1	H Idrogeno																	He Elio																						
2 IIA																17 VIIA		18 VIIIA																						
3	6,941	4	9,0122															10	20,179																					
2	Li Litio		Be Berillio																F Fluoro		Ne Neon																			
3	11 22,9898 +1		12 24,305 +2																17 35,453 -1		18 39,948 0																			
3	Na Sodio		Mg Magnesio																Cl Cloro		Ar Argon																			
3 IIB																		4 IVB		5 VB		6 VIB		7 VIIB		8 VIIIB		9 VIIIB		10 VIIIB		11 IB		12 IIB						
19	39,0983	20	40,08	21	44,9559	22	47,9	23	50,9415	24	51,996	25	54,938	26	55,847	27	58,9332	28	58,7	29	63,546	30	65,38	31	69,72	32	72,59	33	74,9216	34	78,96	35	79,904	36	83,8					
4	K Potassio		Ca Calcio		Sc Scandio		Ti Titanio		V Vanadio		Cr Cromo		Mn Manganese		Fe Ferro		Co Cobalto		Ni Nichel		Cu Rame		Zn Zinco		Ga Gallio		Ge Germanio		As Arsenico		Se Selenio		Br Bromo		Kr Kripton					
5	37 85,4678 +1	38 87,62 +2	39 88,9059 +3	40 91,22 +4	41 92,9064 +5	42 95,94 +6	43 (98) +7	44 101,07 +8	45 102,9055 +9	46 106,4 +10	47 107,868 +11	48 112,41 +12	49 114,82 +13	50 118,69 +14	51 121,75 +15	52 127,6 +16	53 126,9045 +17	54 131,3 +18	55 132,9054 +1	56 137,33 +2	57 138,9055 +3	58 140,9077 +4	59 140,9077 +4	60 144,24 +3	61 (145) +3	62 150,4 +3	63 151,96 +3	64 157,25 +3	65 158,9254 +3	66 162,5 +3	67 164,9304 +3	68 167,26 +3	69 168,9342 +3	70 173,04 +3	71 174,967 +3					
5	Rb Rubidio		Sr Stronzio		Y Ittrio		Zr Zirconio		Nb Niobio		Mo Molibdeno		Tc Tecnezio		Ru Rutenio		Rh Rodio		Pd Palladio		Ag Argento		Cd Cadmio		In Indio		Sn Stagno		Sb Antimonio		Te Tellurio		I Iodio		Xe Xenon					
6	55 132,9054 +1	56 137,33 +2	57 138,9055 +3	72 178,49 +4	73 180,9479 +5	74 183,85 +6	75 186,207 +7	76 190,2 +8	77 192,22 +9	78 195,09 +10	79 196,9665 +11	80 200,59 +12	81 204,37 +13	82 207,2 +14	83 208,9804 +15	84 (209) +16	85 (210) +17	86 (222) +18	87 (223) +1	88 226,025 +2	89 227,028 +3	104 (261) +4	105 (262) +5	106 (266) +6	107 (268) +7	108 (271) +8	109 (268) +9	110 (271) +10	111 (272) +11	112 (277) +12	113 (284) +13	114 (289) +14	115 (288) +15	116 (285) +16	117 (283) +17	118 (289) +18				
6	Cs Cesio		Ba Bario		La Lantanio		Hf Afio		Ta Tantalio		W Tungsteno		Re Renio		Os Osmio		Ir Iniridio		Pt Platino		Au Oro		Hg Mercurio		Tl Tallio		Pb Piombo		Bi Bismuto		Po Polonio		At Astatio		Rn Radon					
7	87 223 +1	88 226,025 +2	89 227,028 +3	104 (261) +4	105 (262) +5	106 (266) +6	107 (268) +7	108 (271) +8	109 (268) +9	110 (271) +10	111 (272) +11	112 (277) +12	113 (284) +13	114 (289) +14	115 (288) +15	116 (285) +16	117 (283) +17	118 (289) +18	119 (288) +1	120 (290) +2	121 (292) +3	122 (293) +4	123 (294) +5	124 (295) +6	125 (296) +7	126 (297) +8	127 (298) +9	128 (299) +10	129 (301) +11	130 (303) +12	131 (305) +13	132 (307) +14	133 (310) +15	134 (312) +16	135 (315) +17	136 (318) +18				
7	Fr Francio		Ra Radio		Ac Attinio		Rf Rutherfordio		Db Dubnio		Sg Seaborgio		Bh Bohrio		Hs Hassio		Mt Meitnerio		Ds Darmstadio		Rg Roentgenio																			

- Metalli Alcalini
- Metalli Alcalino-Terrosi
- Lantanidi
- Attinidi
- Elementi di Transizione
- Metalloidi / Non Metalli
- Alogeni
- Gas Nobili

- STATI di AGGREGAZIONE a 20 °C
- SOLIDI
 - LIQUIDI
 - GASSOSI
 - ARTIFICIALI

Periodo

Gruppo

Numero Atomico: 1
Peso Atomico: 1,0079
Valenza: -1
Densità (g/cm³): 0,0000898
Temp. Fusione (°C): -253
Temp. Ebollizione (°C): -253

Nome: Idrogeno
Simbolo: H
Numero di Ossidazione: 1-1

58 140,12 +4	59 140,9077 +3	60 144,24 +3	61 (145) +3	62 150,4 +3	63 151,96 +3	64 157,25 +3	65 158,9254 +3	66 162,5 +3	67 164,9304 +3	68 167,26 +3	69 168,9342 +3	70 173,04 +3	71 174,967 +3
Ce Cerio	Pr Praseodimio	Nd Neodimio	Pm Promezio	Sm Samario	Eu Europio	Gd Gadolinio	Tb Terbio	Dy Disprozio	Ho Olmio	Er Erbio	Tm Tulio	Yb Itterbio	Lu Lutezio
90 232,0381 +4	91 (209) +4	92 238,029 +6	93 237,048 +6	94 (244) +6	95 (243) +6	96 (247) +4	97 (247) +4	98 (251) +4	99 (252) +4	100 (257) +4	101 (258) +4	102 (259) +3	103 (260) +3
Th Torio	Pa Protoattinio	U Uranio	Np Nettunio	Pu Plutonio	Am Americio	Cm Curio	Bk Berchelio	Cf Californio	Es Einsteinio	Fm Fermio	Md Mendelevio	No Nobelio	Lr Laurenzio

Serie dei Lantanidi

Serie degli Attinidi

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Consideriamo il flusso trasmesso dell'onda e quello riflesso, che sono dati dal prodotto della velocità di propagazione dell'onda v , per il modulo quadro della sua ampiezza:

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \left[\frac{k - \beta}{k + \beta} \right]^2$$

$$T = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2} = \frac{\beta}{k} \left[\frac{2k}{k + \beta} \right]^2$$

Il coefficiente di riflessione R e quello di trasmissione T sono legati dalla relazione: $R+T=1$

Che in altri termini significa che il numero totale di elettroni trasmessi e riflessi è uguale al numero di elettroni incidenti