

# **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

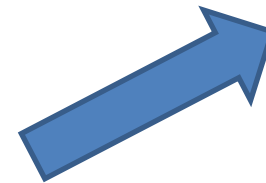
*Esempio 1*

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

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

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

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



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

(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.**

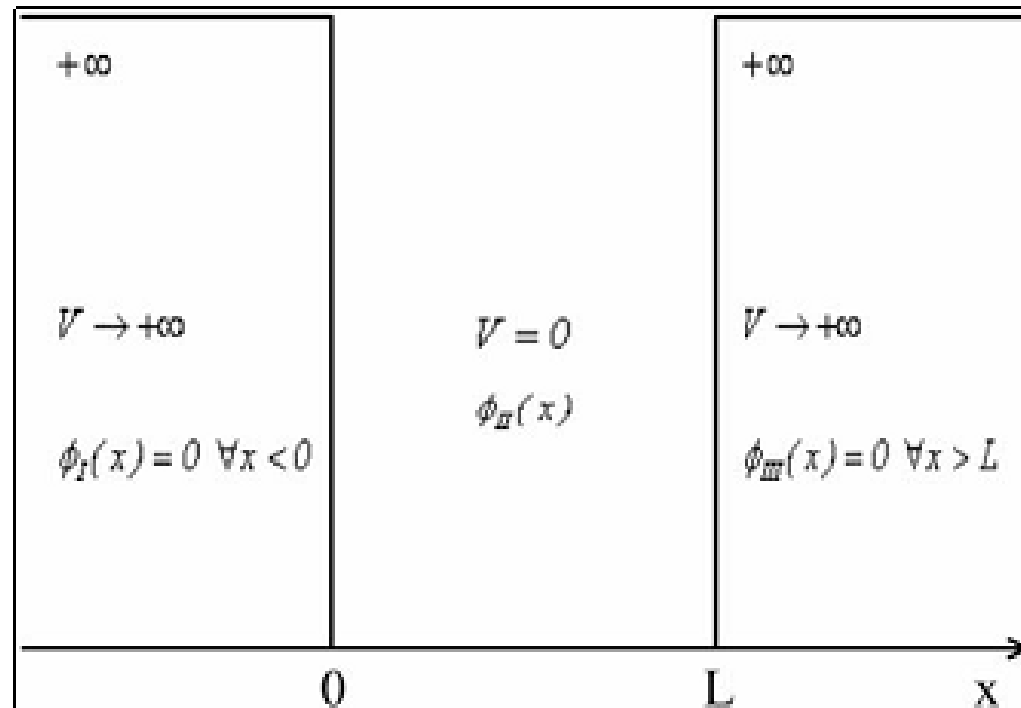
Inoltre, avendo detto che tale funzione d'onda è una funzione complessa, ponendo  $A=1$  e  $B=i$

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

# 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.**

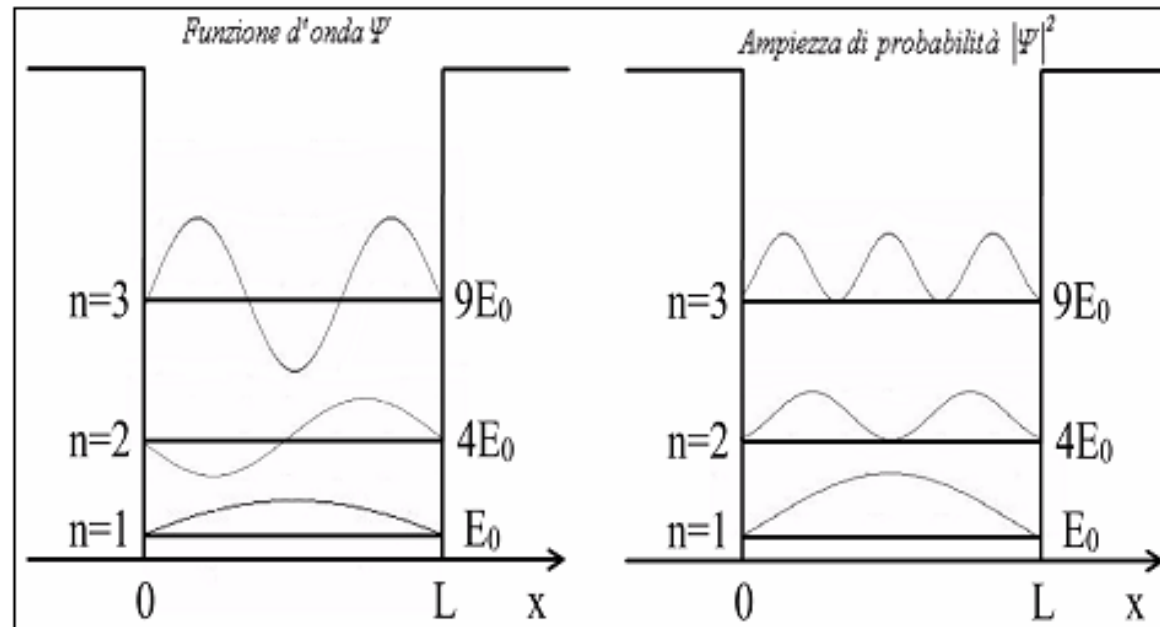
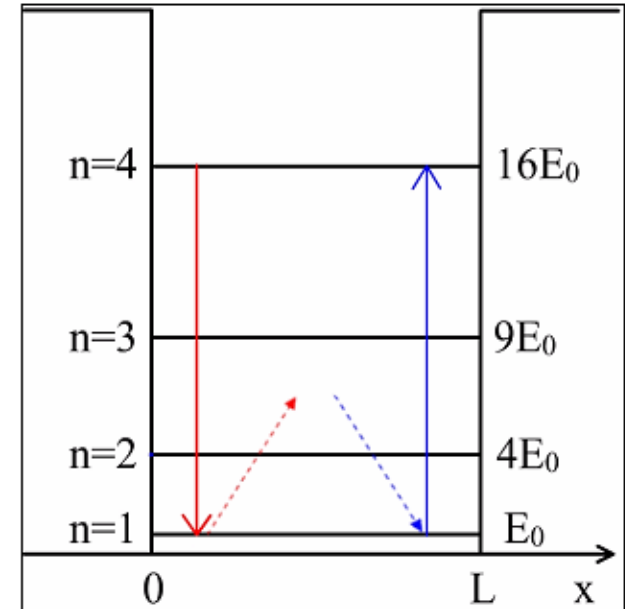


# Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

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

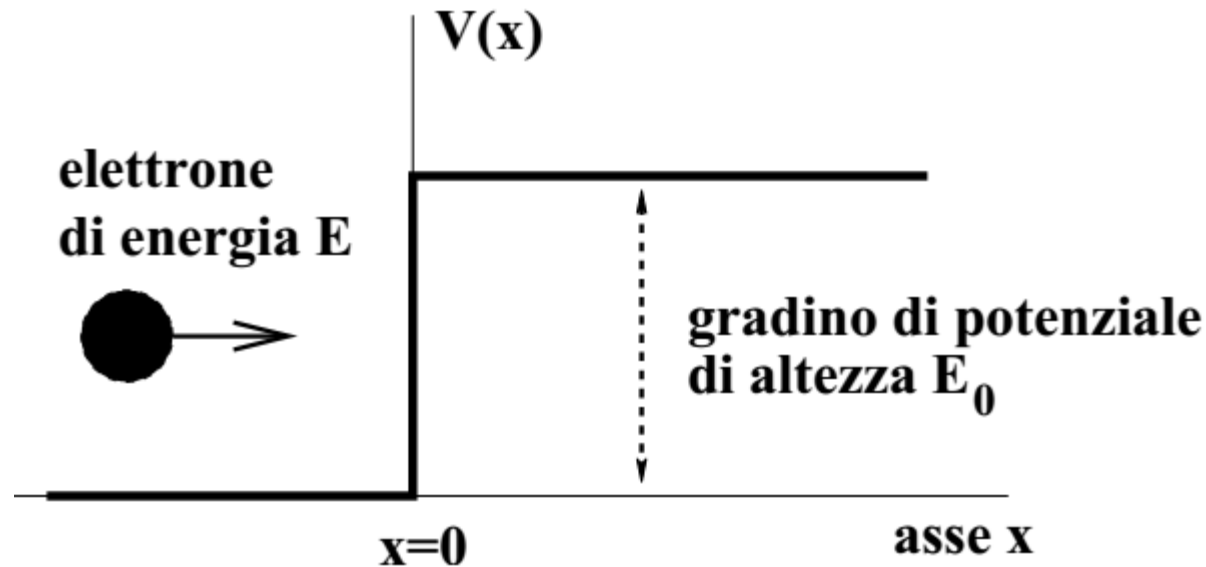
$$\psi(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

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



# 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:

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

$\alpha$  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

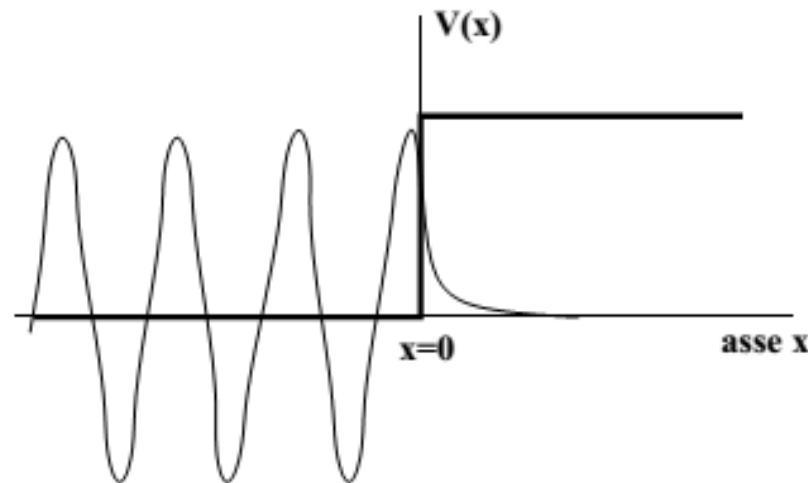
Secondo le leggi della meccanica quantistica

**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  $\alpha$**

**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

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

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

$\beta$  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

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

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

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

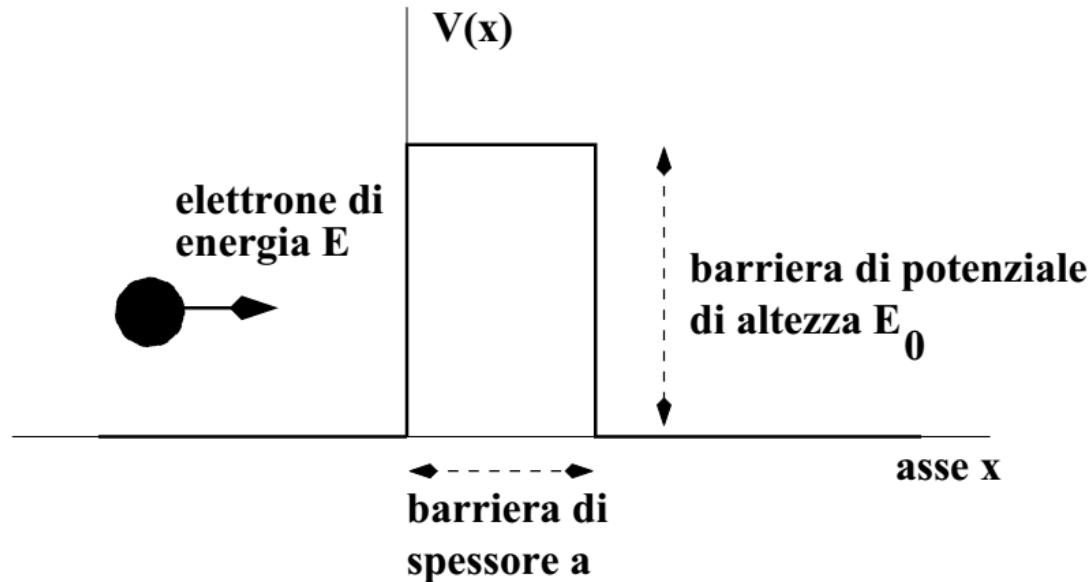
Consideriamo il coefficiente di riflessione

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

**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 maggiore<sup>36</sup>**

# 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  $E < E_0$**

$$\psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

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

$$\psi_3(x) = F e^{ik_2 x} + G e^{-ik_2 x}$$

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

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

La componente  $+\alpha x$  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**

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

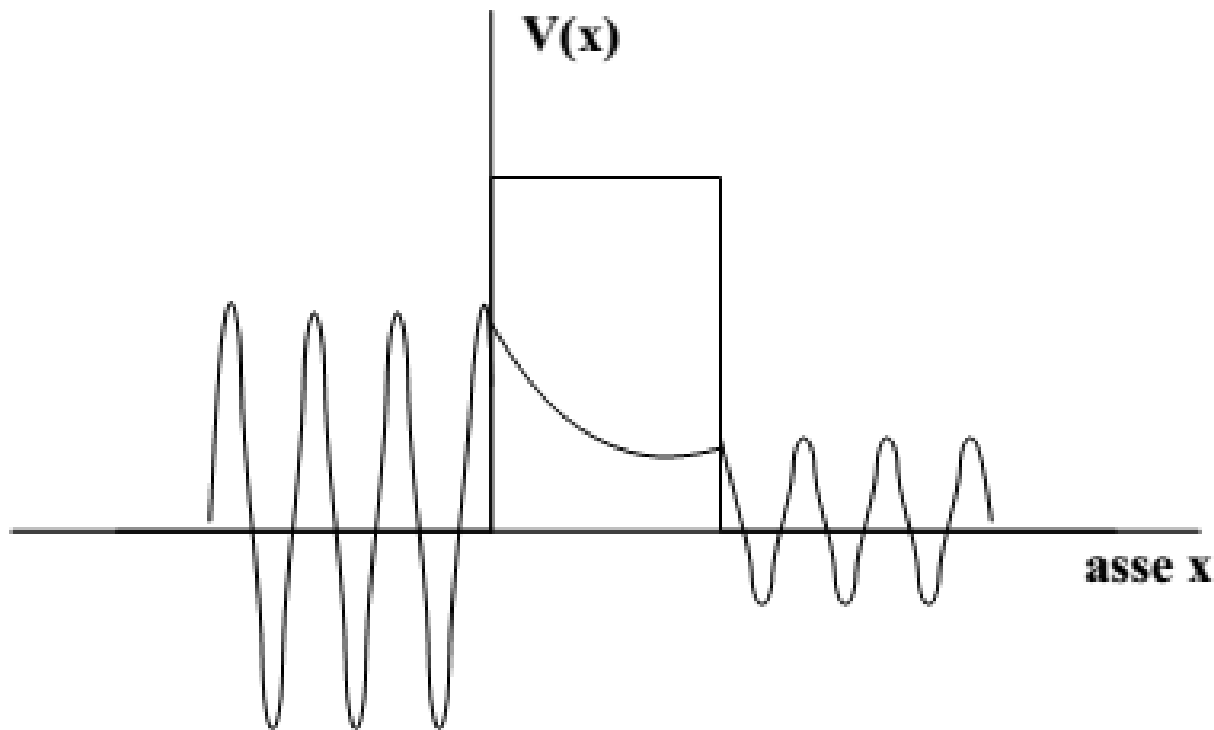
$$\frac{F}{A} = \frac{4ik\alpha e^{-2ika}}{(\alpha + ik)^2 e^{-2\alpha a} - (\alpha - ik)^2 e^{2\alpha a}} \approx \frac{4ik\alpha e^{-2ika}}{(\alpha + ik)^2} e^{-2\alpha a}$$

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

# 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  $E > E_0$**

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

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

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

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

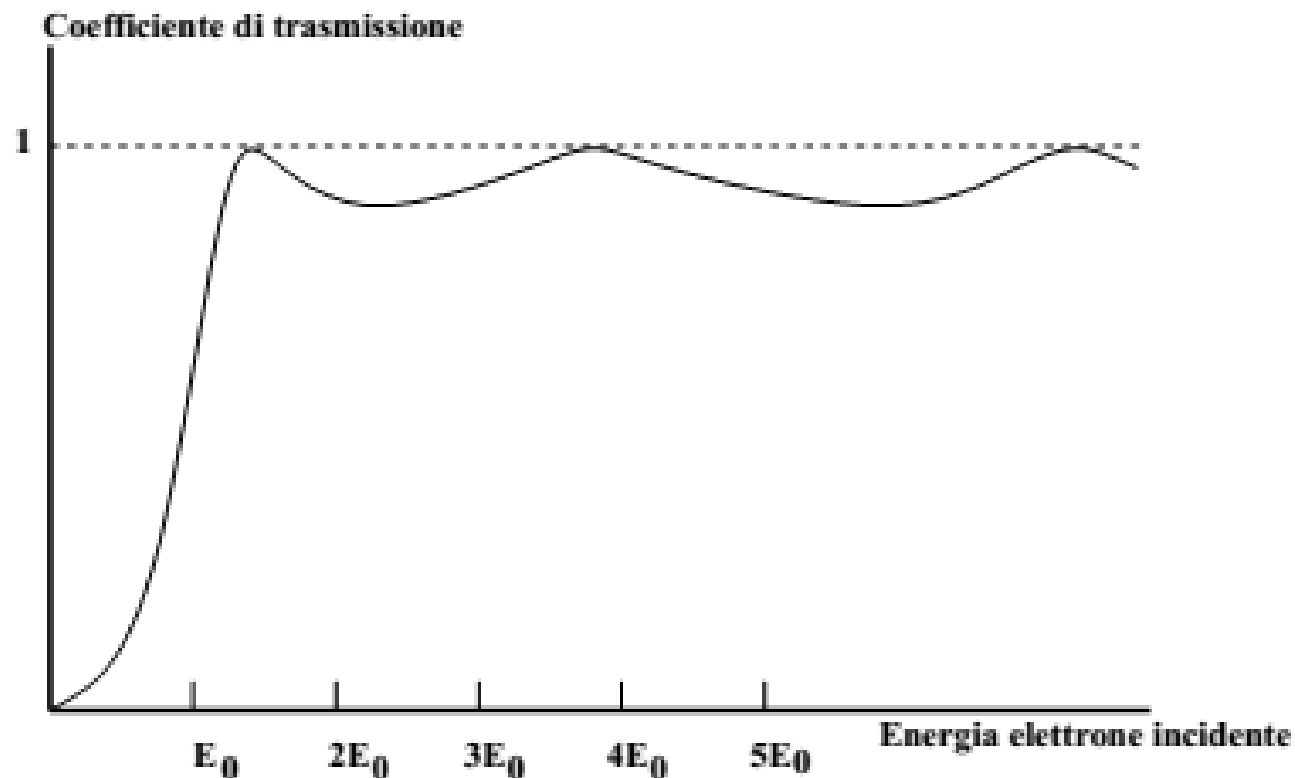
$$\beta = \sqrt{\frac{2m_e (E - E_0)}{\hbar^2}}$$

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.

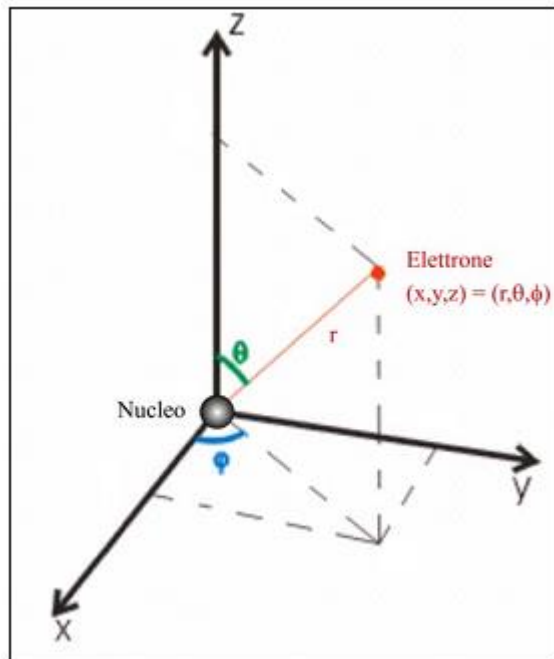
La discretizzazione dell'energia non è più un'ipotesi “utile a far tornare i conti”, ma discende da un'equazione generale, che vale in qualunque sistema, e che dunque unifica le diverse problematiche di tutti i possibili sistemi sotto un'unica metodologia di soluzione.

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

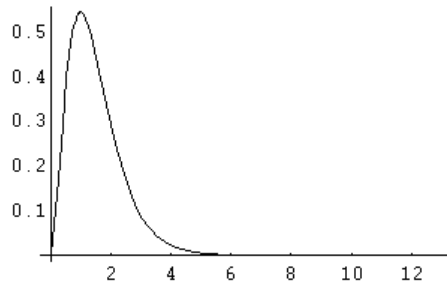
Definiamo i due numeri interi,  $n$  (numero quantico principale, che assume i valori  $n = 1, 2, 3, \dots$ ) ed  $l$  (numero quantico secondario o angolare, che assume i valori  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ).

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

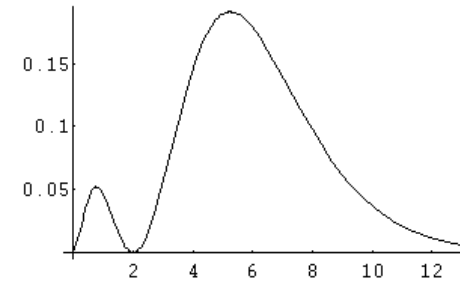
Per il primo stato eccitato ( $n = 2$ ) i valori di  $l$  divengono due ( $l = 0$  ed  $l = 1$ ), ai quali corrisponde tuttavia **un unico livello di energia** (in quanto  $E_n$  dipende **unicamente da  $n$** ): in tal caso si parlerà di **livelli energetici degeneri**, che, non rappresentano lo stesso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



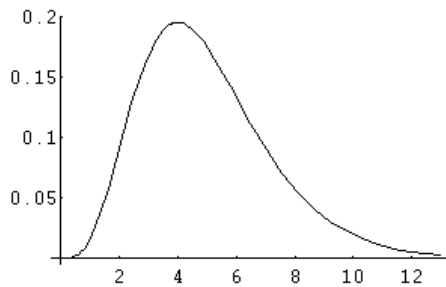
# L'atomo di idrogeno



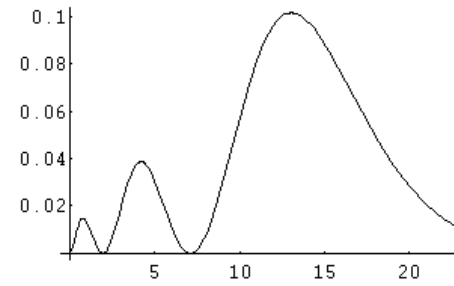
Stato 1s,  
 $n=1, l=0$



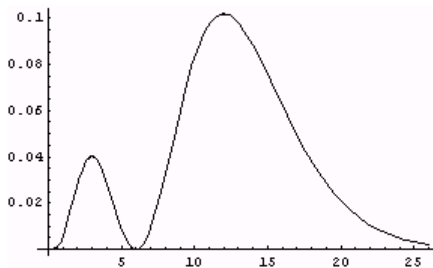
Stato 2s,  
 $n=2, l=0$



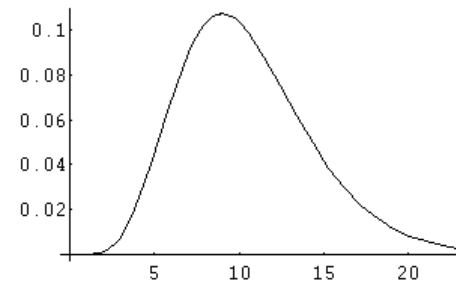
Stato 2p,  
 $n=2, l=1$



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

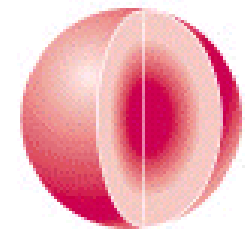
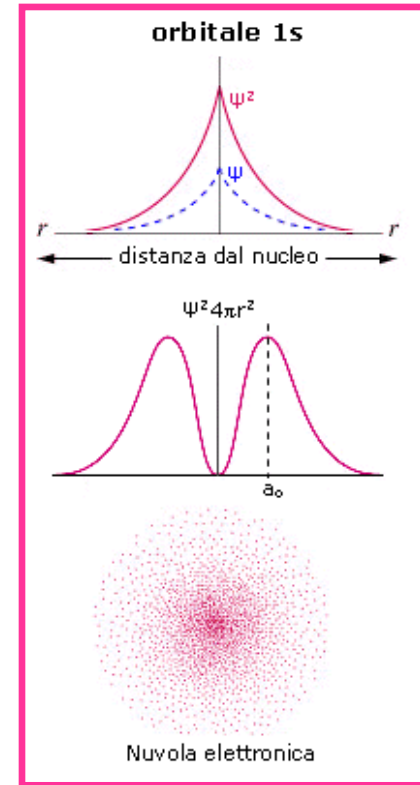
# Gli orbitali atomici

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

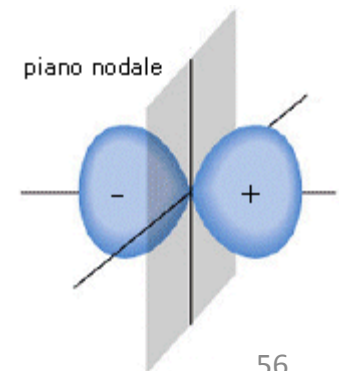
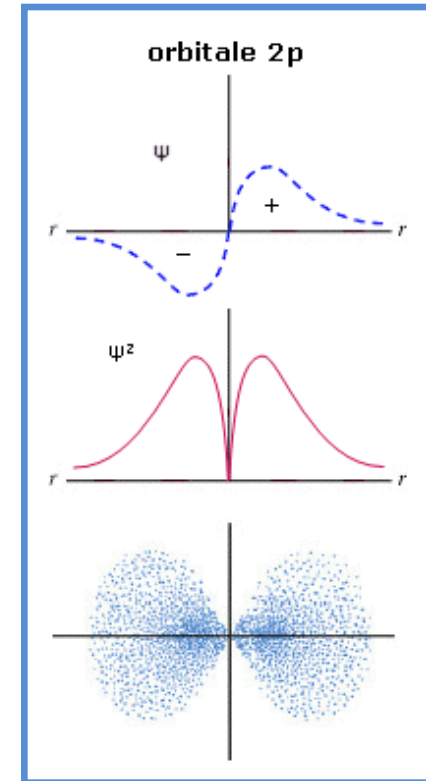
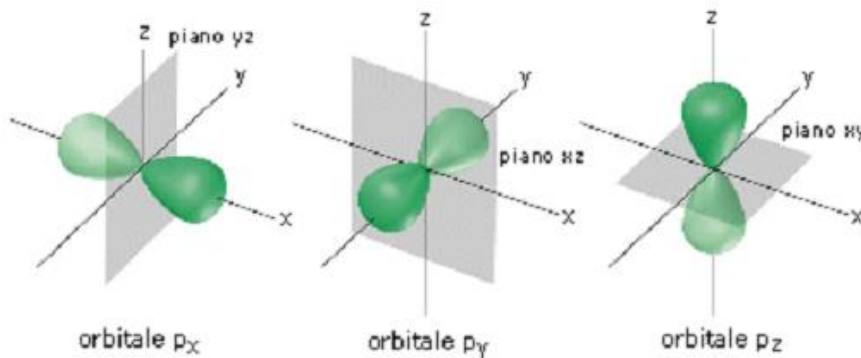


# Gli orbitali atomici

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  $\Psi$  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,  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  e lo spin  $\chi$ .**



# 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**.

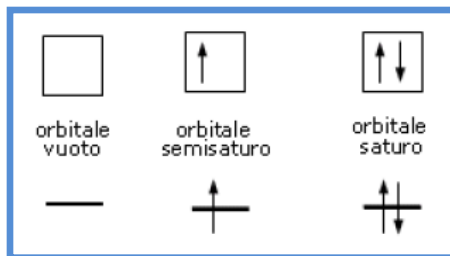
Lo spin (**momento angolare intrinseco**) è una caratteristica vettoriale degli elettroni (gli elettroni si comportano come minuscole trottole che ruotano attorno al proprio asse e quindi possiedono un momento angolare).

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)

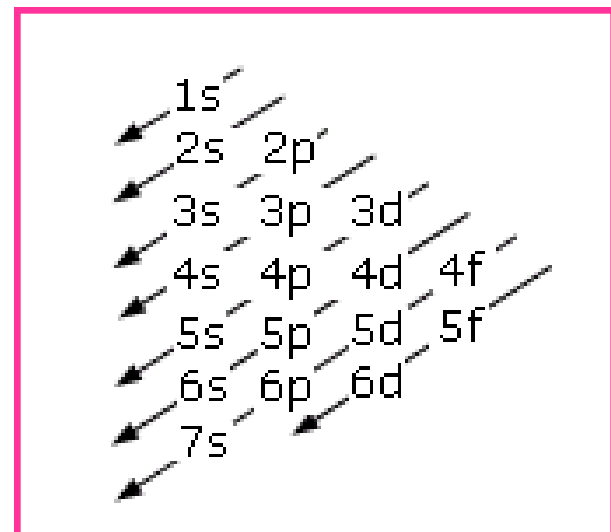
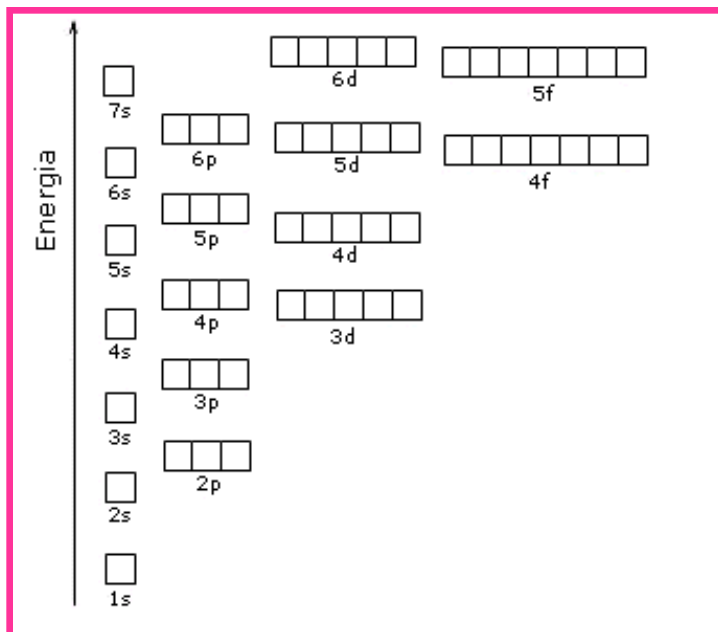
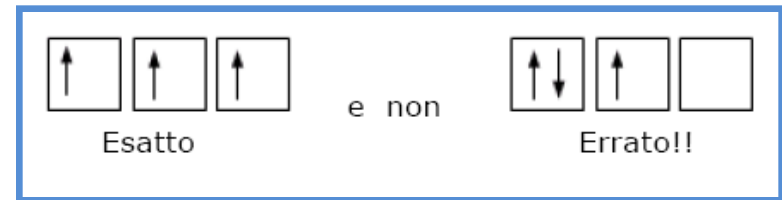
# Configurazione elettronica esterna

## 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

1 IA																												18 VIIIA	
1	2																	10	11										
1	2																	10	11										
3	4																	10	11										
2	3	4																	10	11									
3	4																	10	11										
4	5	6	7	8	9	10	11	12									13	14	15	16	17	18							
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36												
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54												
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86												
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111																			

**Metalli Alcalini** (Yellow)

**Metalli Alcalino-Terrosi** (Orange)

**Lantanidi** (Light Purple)

**Attinidi** (Pink)

**Elementi di Transizione** (Light Blue)

**Metalloidi / Non Metalli** (Light Green)

**Alogeni** (Light Cyan)

**Gas Nobili** (Light Yellow)

STATI di AGGREGAZIONE a 20 °C

SOLIDI (Black)

LIQUIDI (Blue)

GASSOSI (Red)

ARTIFICIALI (White)

Periodo

Gruppo

Numero Atomico

Peso Atomico

Valenza

Densità (g/cm<sup>3</sup>)

Temp. Fusione (°C)

Temp. Ebollizione (°C)

Numero di Ossidazione

Simbolo

Nome

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103

Serie dei Lantanidi

Serie degli Attinidi

# La tavola periodica degli elementi

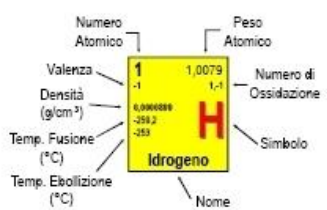
1 IA																												18 VIIIA	
1	H																2	He											
1		2										17 VIIA		18 VIIIA															
3	4															9	10												
Li	Be															F	Ne												
2		3										16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA													
11	12															8	9	10											
Na	Mg															O	F	Ne											
3		4										15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA											
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36												
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr												
4		5										14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA									
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54												
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe												
5		6										13 IIIA		14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA							
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86												
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn												
6		7										12 IIB		13 IIIA		14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA					
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111																			
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg																			
7		8										11 IB		12 IIB		13 IIIA		14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA			

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



Periodo

Gruppo



58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Serie dei Lantanidi													
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
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