

# STRUTTURA ELETTRONICA DEGLI ATOMI

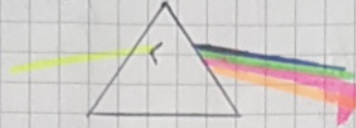
$$\text{Freq} = \nu = \frac{1}{T} \rightarrow \text{periodo}$$

velocità di prop. nel vuoto  $\lambda \nu = c$

L'uomo percepisce radiazioni da 400 a 700 nm di lunghezza d'onda

## Diffrazione della luce:

La luce è rifratta con angoli diversi.



Subisce diffrazione se passa per un foro di dimensioni inferiori alla lunghezza d'onda

Principio di funzionamento del C

## La crisi della fisica classica

### - Stabilità dimensionale

La carica in movimento rettilineo e uniforme perde energia e segue una traiettoria a spirale

### - Effetto fotoelettrico

L'emissione di elettroni avviene se l'energia della radiazione incidente è superiore ad  $E_0$

Fotocellule

L'intensità di elettroni emessi è  $\propto$  all'intensità della radiazione

$$E_{\text{cin}} = E - E_0 = h(\nu - \nu_0)$$

$\nu_0$  Frequenza di soglia

$h\nu$



$$E = h\nu > E_0$$

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \rightarrow \text{Costante di Planck}$$

La radiazione di  $\nu$  è costituita da fotoni. L'E trasportato dal fotone dipende dalla radiazione.

L'energia di un fascio di fotoni  $n$  di frequenza  $\nu \rightarrow E = n h \nu$

Quantizzazione della radiazione elettromagnetica (Einstein)

### Teoria di Planck

Scambio di energia fra materia e radiazione in pacchetti o quanti

$$E = h \nu$$

## Atomo di Bohr

- 1) Quantizzazione di livelli di energia
  - 2) Emissioni di radiazione solo in corrispondenza del passaggio da uno stato elettronico all'altro.
- Per passare dal  $n=1$  al  $n=2$  l'energia emessa è maggiore di quella da  $n=2$  a  $n=3$ .

Il colore dipende dalle radiazioni riflesse dagli oggetti

Lampade con gas diversi hanno colori diversi.

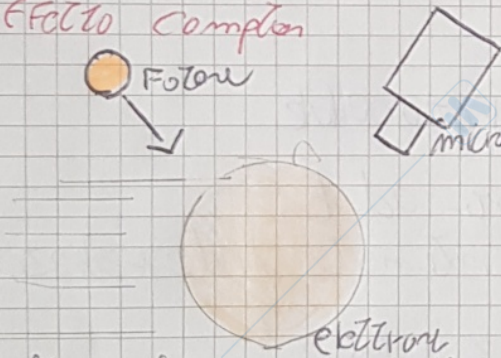
Saggio alla fiamma o spettro  
Il colore può essere cambiato anche dal vetro che lascia passare onde che hanno determinata lunghezza.

Il nero: assorbe tutte le radiazioni e le emette sotto forma di calore

Il bianco: assorbe e riemette tutte le radiazioni

Per conoscere la traiettoria bisogna sapere Principio di indeterminazione di Heisenberg

### Effetto Compton



Se aumento la lunghezza d'onda del fotone lo perturbo di meno ma ho incertezza sulla posizione  
Se aumento la frequenza so dove si trova ma ne modifico la quantità di moto

Dopo l'urto il fotone prende il posto dell'elettrone

Non posso sapere con precisione dov'è l'elettrone e dove sta andando

↓  
Principio filosofico

## Onde di De Broglie

Ogni moto si accompagna con la propagazione di onde (meccanica ondulata)

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

↓  
Dz qui il dualismo Onde-particelle

↓  
Approccio probabilistico

## Equazione di Schrödinger

Sviluppa una teoria sulla meccanica ondulata modificando quella di De Broglie. L'equazione d'onda è un'equazione differenziale. La adatta agli elettroni "vincolati"

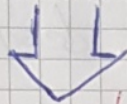
www.unidocs.it - Appunti e dispense per superare i tuoi esami universitari

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 F}{\partial t^2}$$

- Densità di energia (E/V)  $\propto f^2$
- Densità di energia (E/V)  $\propto$  (numero di fotoni / unità di volume)
- (numero di fotoni / unità di volume)  $\propto$  probabilità di trovare un fotone

$f^2$  è direttamente proporzionale alla probabilità di trovare un fotone

Non è possibile sapere con certezza la posizione di un elettrone ma esiste una formula che ne descrive la probabilità di trovarlo



### L'equazione di Schrödinger

per gli stati stazionari a energia costante:  $\Psi = \Psi(x, y, z)$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 m}{h^2} (E - E_p) \Psi = 0$$

Derivate seconde parziali della funzione  $\Psi$  nelle direzioni  $x, y, z$

↓  
Energia totale dell'elettrone  
↓  
Energia potenziale dell'elettrone  
↔  
la funzione d'onda

$E$  e  $\Psi$  sono incognite. Essendo un'equazione a due incognite esistono infinite soluzioni.

$\Psi$  non ha significato fisico ma  $(\Psi)^2$  indica la densità di probabilità di trovare un elettrone in un volume infinitesimo.

Affinché esistano soluzioni:

- Condizione di normalizzazione

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

La probabilità di trovare l'elettrone in tutto lo spazio deve essere 1

- essere continue

- annullarsi all'infinito



La funzione risulta avere senso solo per determinati autovalori ( $E_n$ ) e per le corrispondenti autofunzioni ( $\Psi_n$ ).

Gli autovalori sono  $E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$  oppure  $E_n = -\frac{C_{osc}}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2}$

Con  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$  numero quantico principale  
(Quantizzazione dell'energia)

La funzione d'onda non ha significato fisico ma  $|ψ|^2$  è probabilità di trovare l'elettrone nel punto considerato.

Le coordinate  $(x, y, z)$  dipendono dai numeri quantici  $(n, l, m)$   
Ogni funzione definita da 3 numeri quantici è detta orbitale.

Numeri quantici

• Numero quantico principale n: definisce il livello di energia che è più alto  
 $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

• Numero quantico secondario l: descrive le forme dell'orbitale  
 $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$   
s p d f

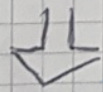
• Numero quantico magnetico m: descrive l'orientazione nello spazio  
 $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$

• Numero di spin  $m_s$ : rotazione sull'asse  
 $m_s = \pm 1/2$   
non descrive l'orbitale  
+1/2 spin up    -1/2 spin down  
Piu m aumente piu l'orbitale è basso e stabile  
maxima attrazione nucleo-elettrone

Superficie di equiprobabilità: superficie che delimita il volume dove si ha una probabilità del 95% di trovare l'elettrone  
 $\int_V |ψ|^2 dV = 0,95$

orbitali  
s: simmetria sferica    p: simmetria cilindrica    d: ?

L'equazione di Schrödinger viene risolta esattamente solo per l'idrogeno



È impossibile scrivere un'equazione che descriva esattamente il comportamento di particelle positive e negative  
↳ considero le repulsioni fra di loro

L'energia degli atomi dipende da n e da l.  
Orbitali di forme diverse hanno diverse capacità di penetrazione

La disposizione degli elettroni negli orbitali segue i seguenti principi:

- Principio della minima energia
- I sistemi si dispongono dal livello energetico più basso al più alto
- Principio dell'esclusione di Pauli  
In ogni orbitale non ci possono essere 2 elettroni con le stesse quattro numeri quantici. Differiscono per id m spin.
- Regole di Hund o di massima molteplicità  
Gli elettroni tendono a distribuirsi negli orbitali liberi

3e in 3 orbitali p



L'ordine di riempimento dell'orbitale

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p \dots$$

Leggo la tavola periodica col principio di "aufbau"

1s<sup>2</sup> → numero di elettroni nell'orbitale

→ simbolo dell'orbitale  
Numero quantico n

$$s = 2 \quad p = 6 \quad d = 10 \quad f = 14$$