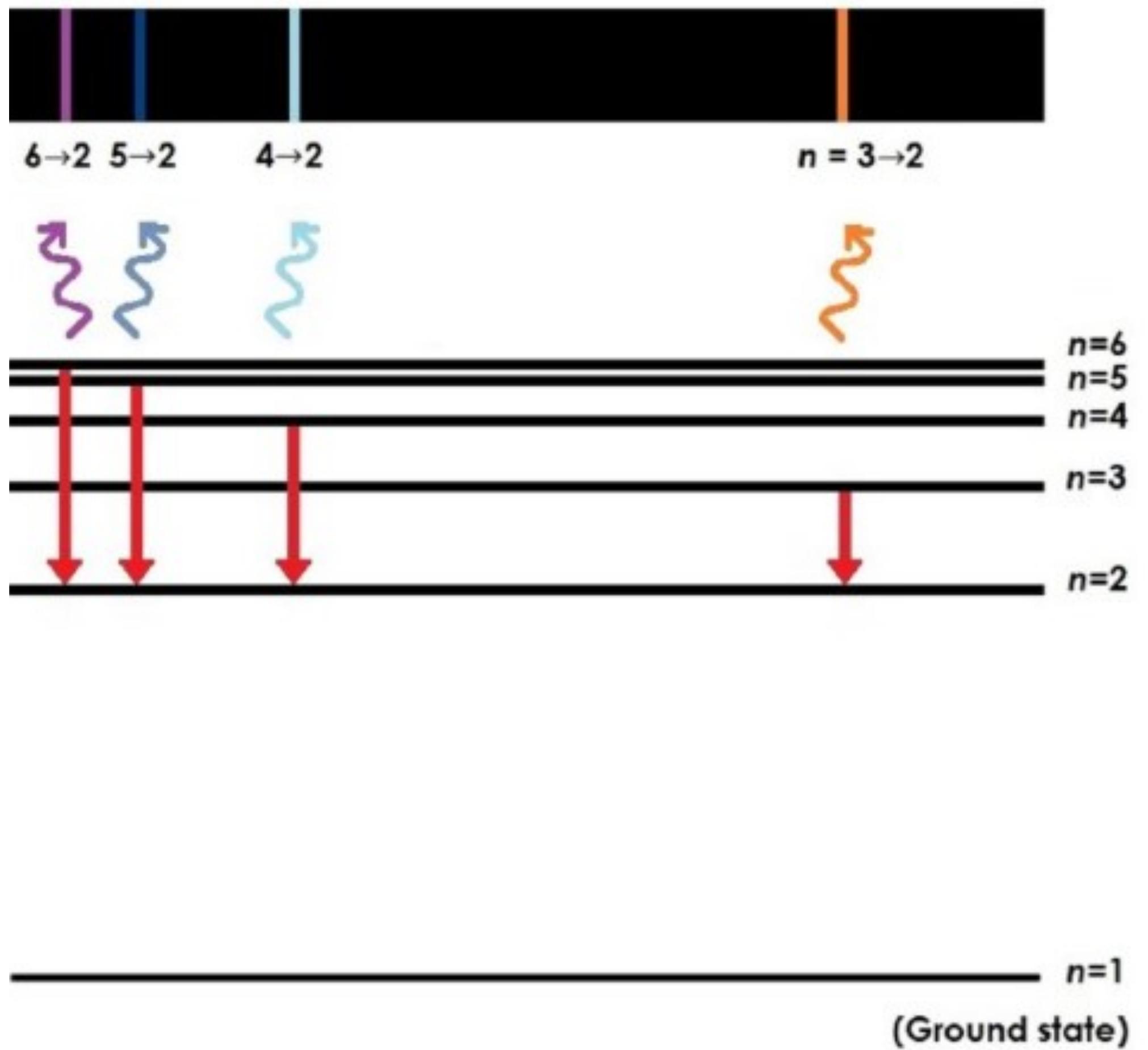


# **Atomo di idrogeno**

# Atomo di Bohr (1913)

- $E_n = -\frac{Z^2 R}{n^2}$
- $R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0 h^3 c} = 1.097 \cdot 10^7 m^{-1}$
- $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Z m_e e^2} = \frac{0.0529}{Z} \text{\AA}$



# Implementazioni successive

- Il modello venne esteso ad atomi pluriellettronici ricorrendo a costanti empiriche.
- Per ogni  $n$  (numero quantico principale) sono possibili  $2n^2$  elettroni.
- Sommerfeld (1915) introduce il numero quantico  $l$  (numero quantico angolare o azimutale) per razionalizzare gli spettri atomici.  $l=0, \dots, n-1$ . Lo collega al momento angolare e alla forma delle orbite.
- Lo stesso Sommerfeld introduce il numero quantico magnetico  $m=-l, \dots, +l$  per descrivere l'effetto Zeeman (Cambiamenti degli spettri degli atomi in presenza di un campo magnetico) che collega all'orientamento degli orbitali.
- La teoria di Sommerfeld ha solo un interesse storico.

# L'atomo secondo la teoria di Schrödinger

- La cosiddetta prima fase ( o prima teoria) quantistica sviluppata da Planck, Bohr, Sommerfield, etc. Introduce la quantizzazione in modo empirico.
- Solo in seguito alla teoria quantistica di Schrödinger le regole di quantizzazione si ottengono “*naturalmente*” dal formalismo matematico.
- Andiamo a vedere i principali aspetti di questa teoria che sono di nostro interesse per il proseguimento del corso.

# Natura ondulatoria e corpuscolare dell' elettrone

- Alcuni esperimenti mostrano che l'elettrone ha proprietà ondulatorie. Per esempio è soggetto a diffrazione.
- Allo stesso tempo massa, carica e dipolo magnetico dell'elettrone sono stati misurate.

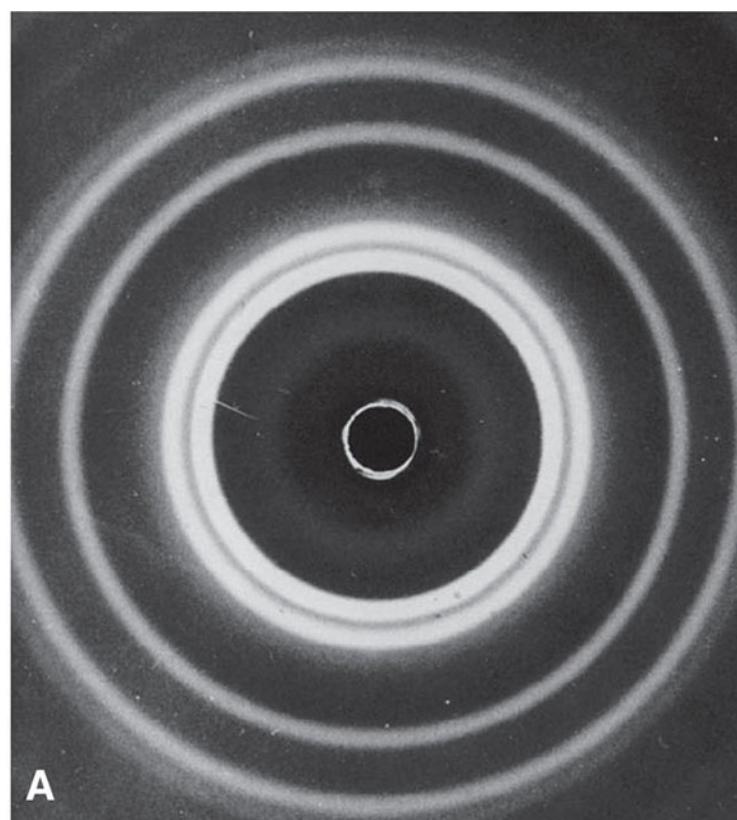


Figura di diffrazione dei raggi X generata da un foglio di alluminio

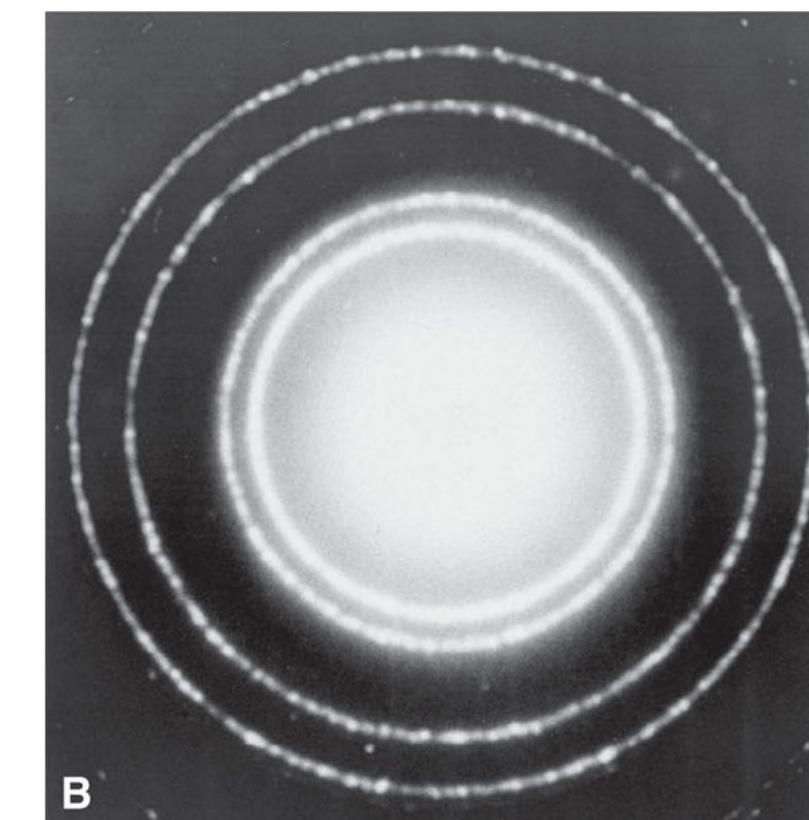
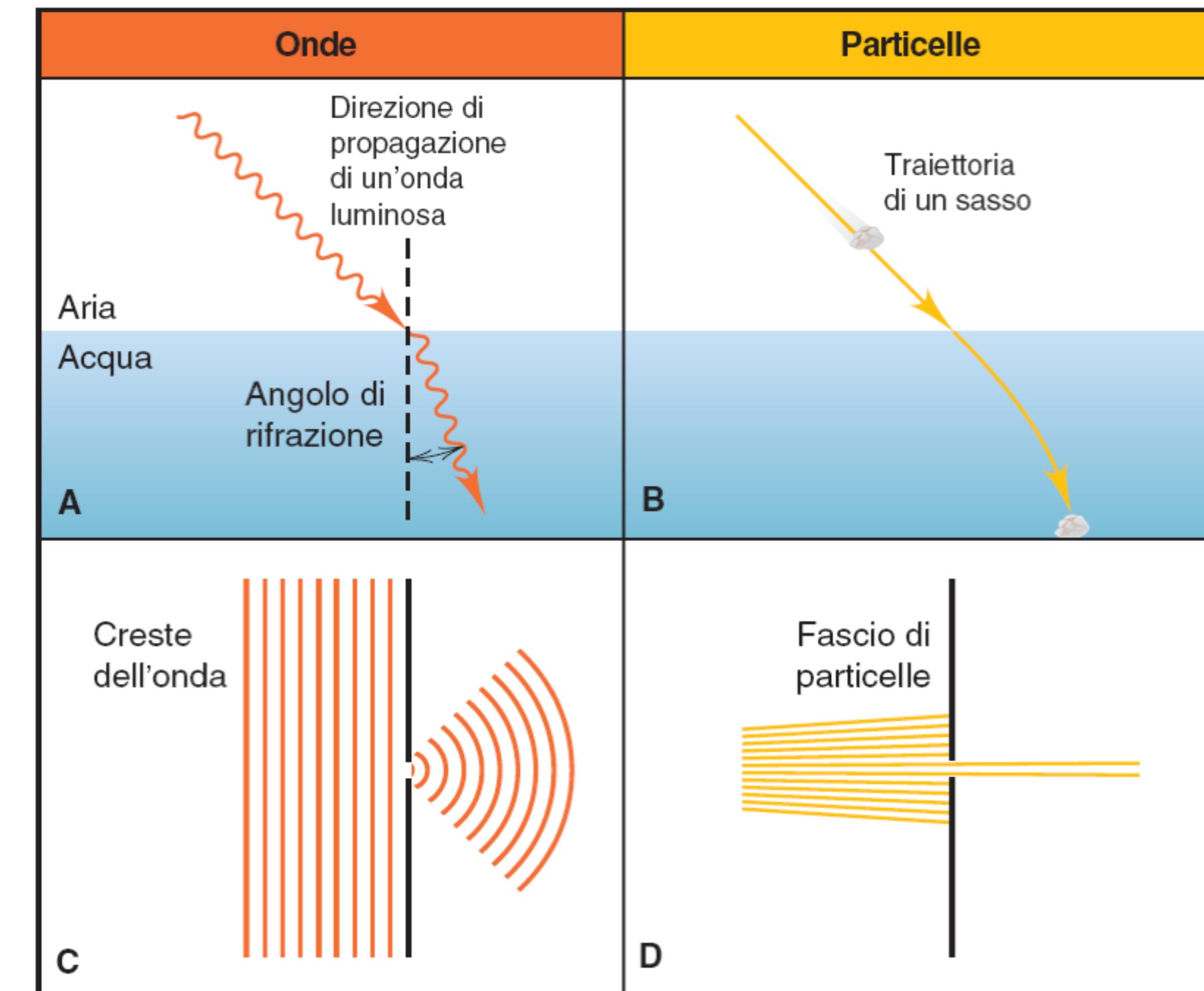


Figura di diffrazione degli elettroni generata da un foglio di alluminio



# Natura ondulatoria e corpuscolare dell' elettrone

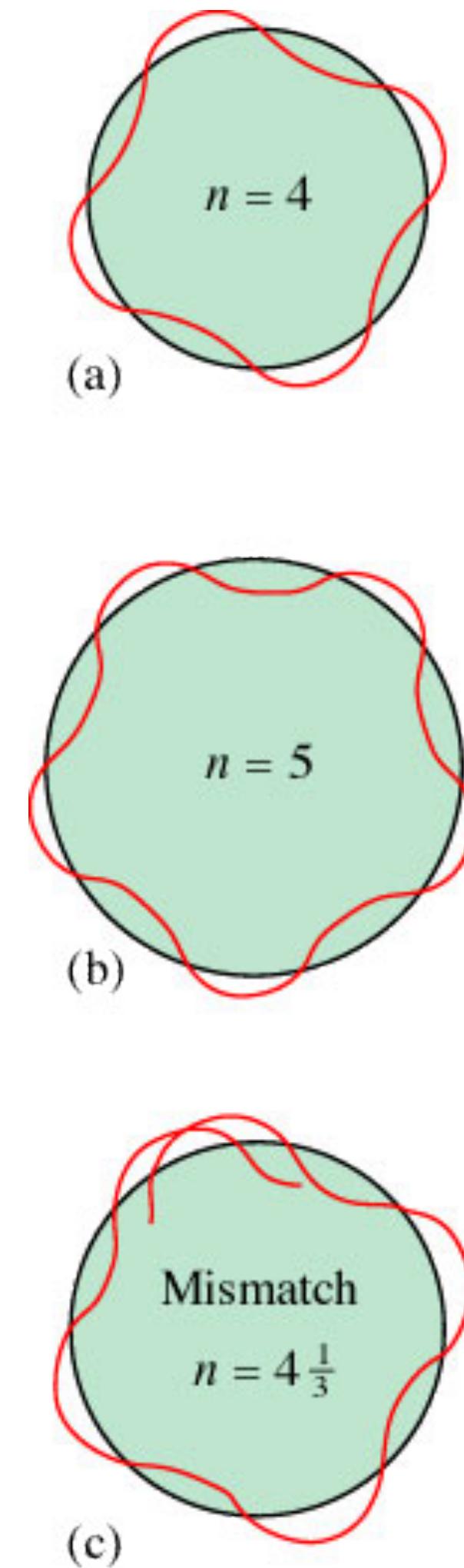
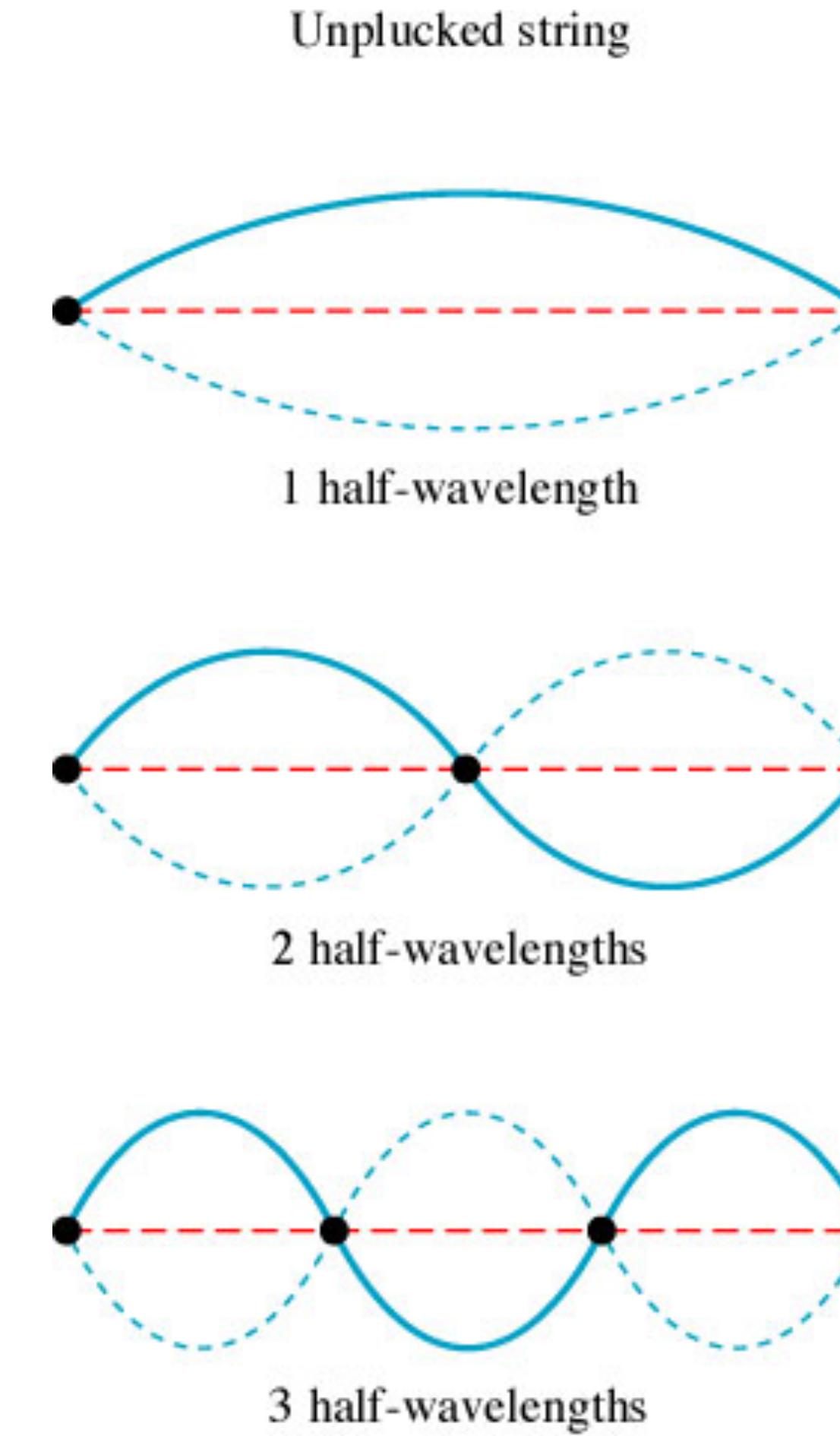
- Il principio di indeterminazione di Heisenberg stabilisce l' impossibilità di misurare simultaneamente posizione e momento di una particella.

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

- Per l'elettrone che ha una massa molto piccola la conseguenza è che esso è un oggetto irriducibilmente quantistico che non può essere descritto classicamente.

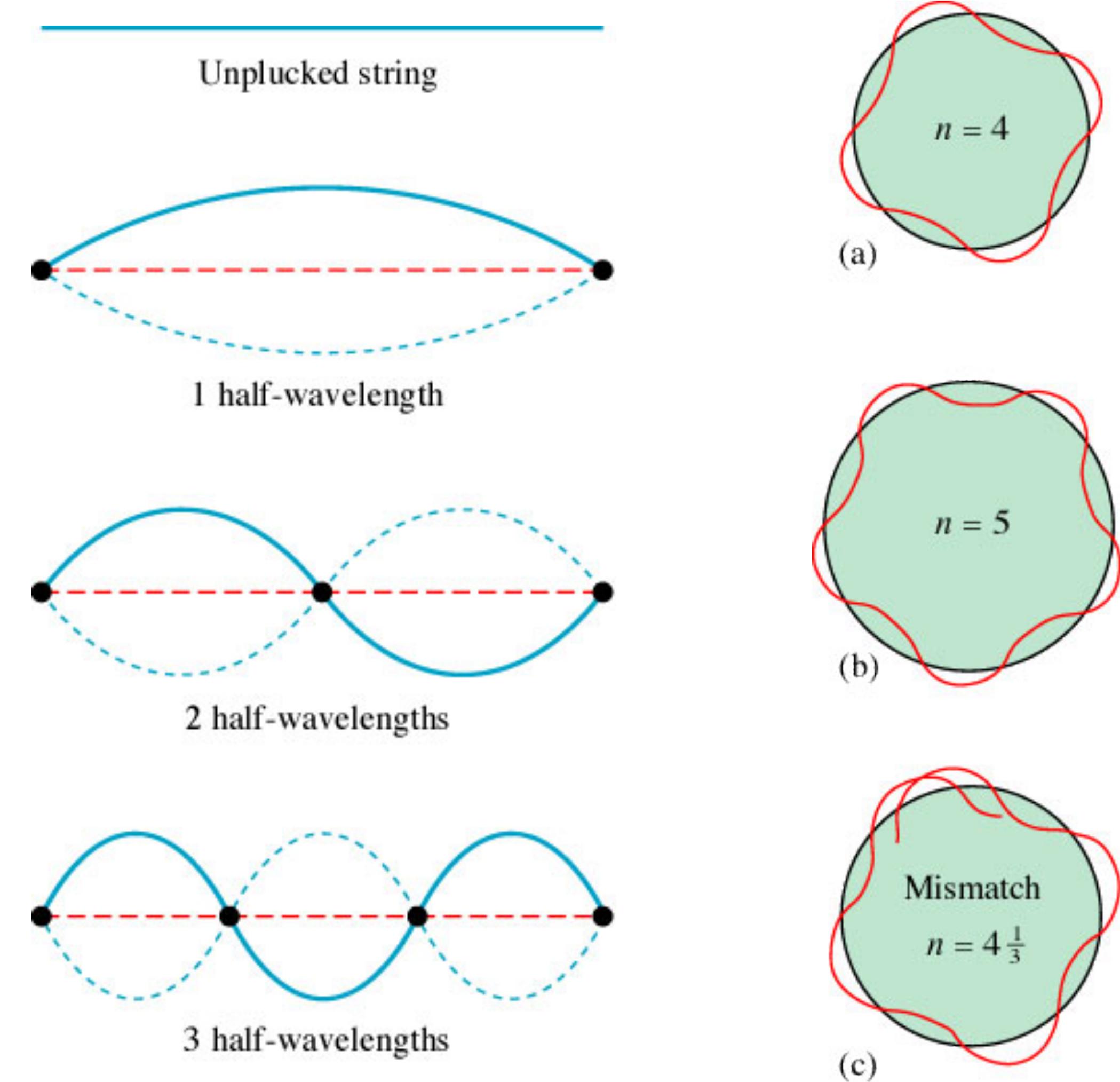
# Funzione d'onda

- L'elettrone è descritto da una funzione d'onda  $\varphi(\vec{r})$ , oggetto matematico che rimpiazza posizione, velocità e traiettoria.
- La funzione d'onda descrive un onda stazionaria tridimensionale.
- Le grandezze fisiche sono legate alla funzione d'onda tramite relazioni matematiche. Per esempio  $|\varphi(\vec{r})|^2$  corrisponde alla probabilità di trovare l'elettrone nel punto  $\vec{r}$ .



# Funzione d'onda

- Se integriamo  $|\varphi(\vec{r})|^2$  su tutto lo spazio otteniamo 1 (un elettrone intero, una particella).
- La forma della funzione d'onda dipende dal potenziale a cui è sottoposto l'elettrone.



# Atomo di idrogeno

- Un atomo di idrogeno è un sistema costituito da un nucleo (un protone nel caso dell' isotopo più comune) e da un elettrone.
- La loro energia è minore del sistema costituito dalle due particelle separate (all' infinito). Solo in questo caso (stati legati) l'energia è quantizzata.
- Nucleo ed elettrone si attraggono. Secondo la fisica classica alla fine l' elettrone dovrebbe “cadere” sul nucleo. Ma questo violerebbe il principio di indeterminazione; se  $\Delta x = 0$   $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  non è possibile.
- In linea di principio sia nucleo che elettrone dovrebbero essere descritti da una funzione di onda.

# Atomo di idrogeno

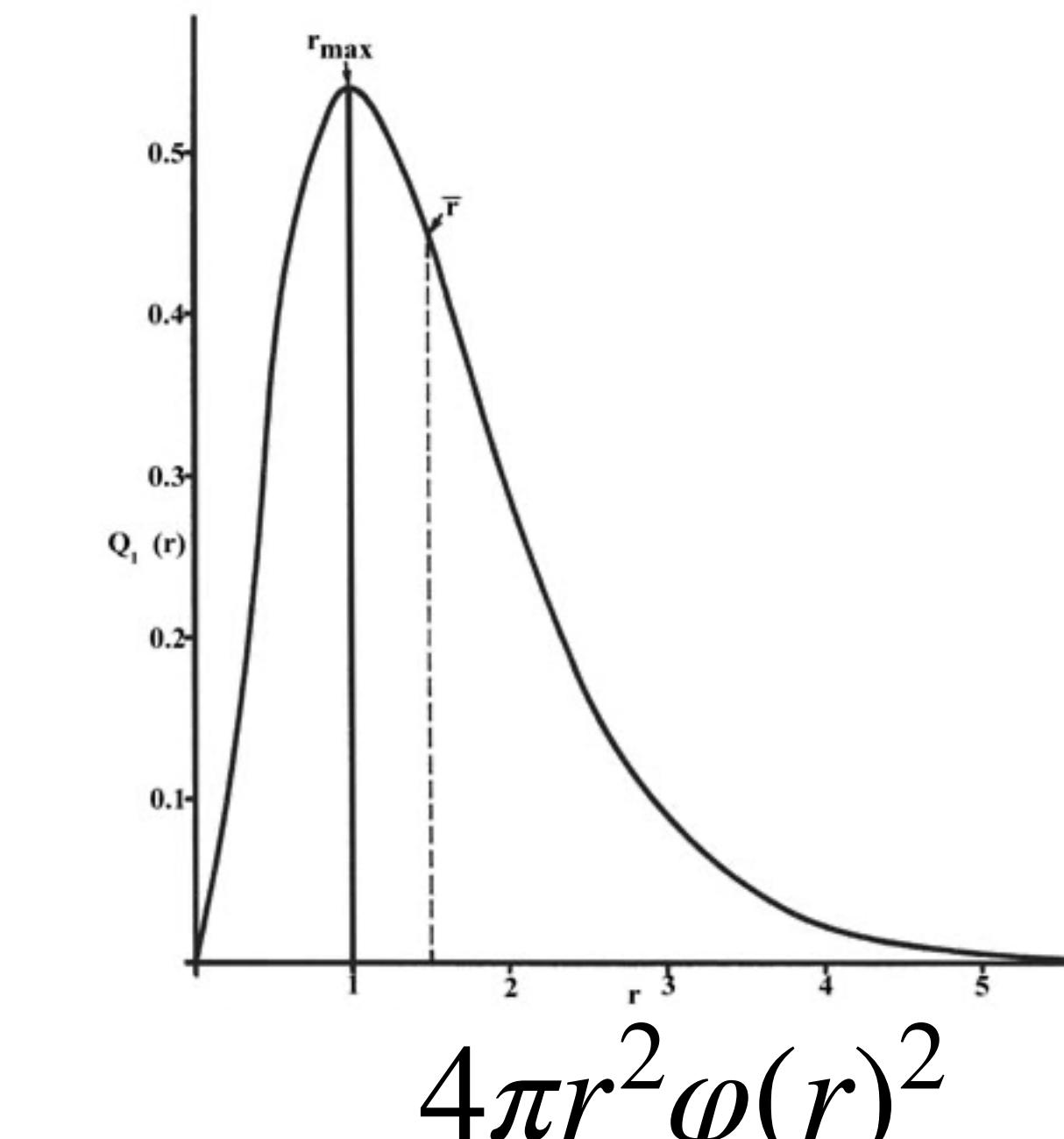
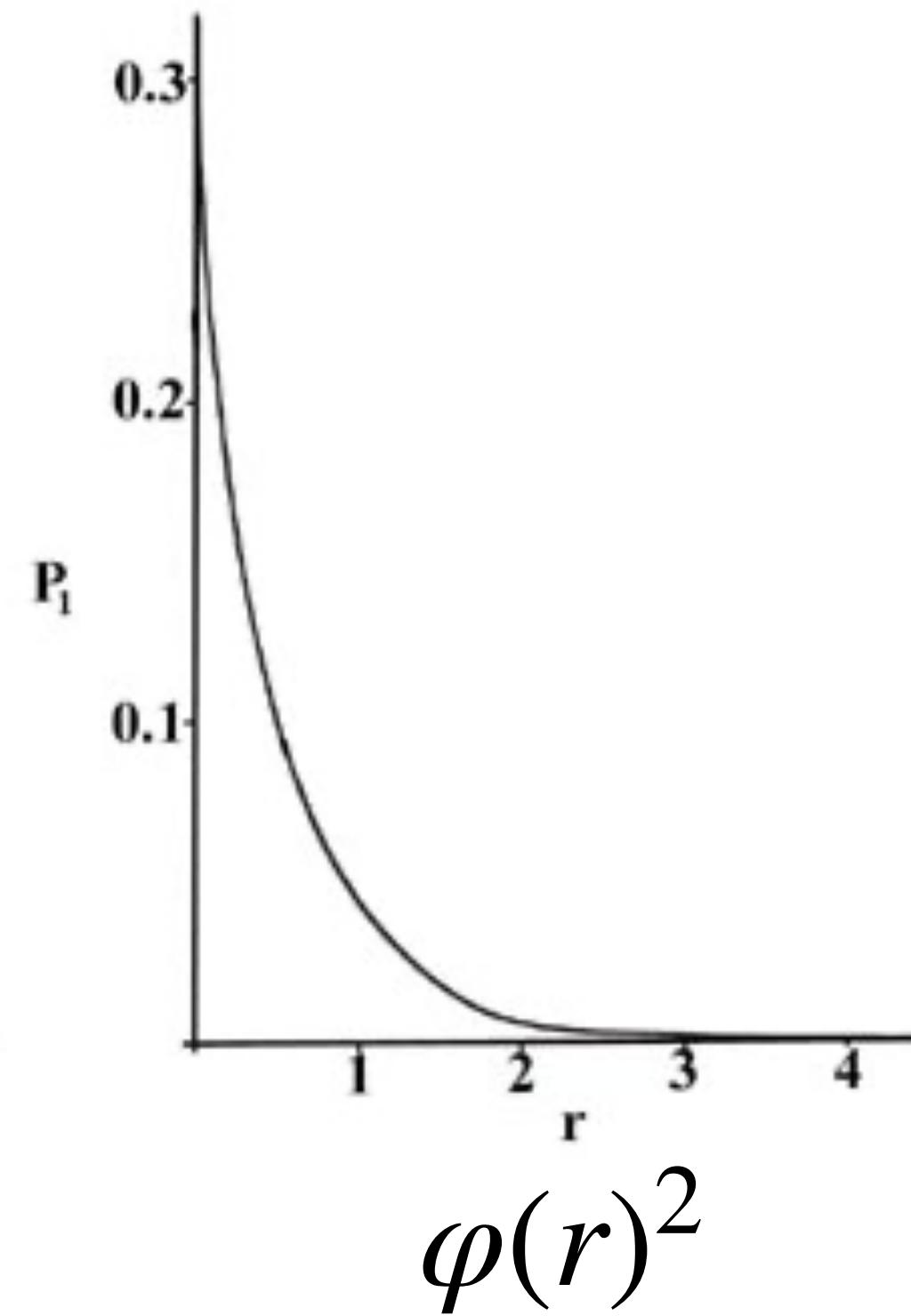
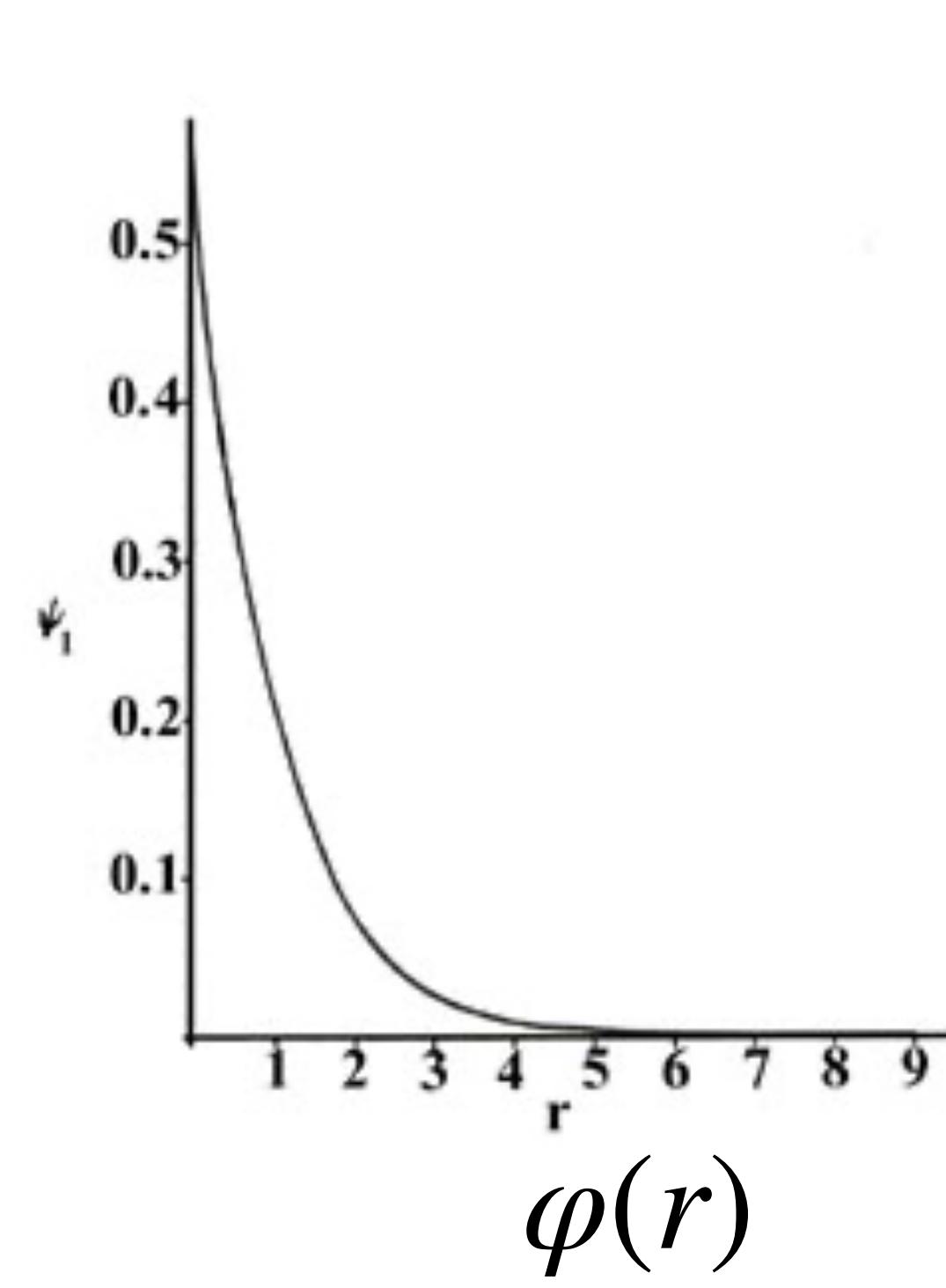
- In pratica la massa del nucleo (circa 2000 volte maggiore) è tale che lo possiamo approssimare con una carica puntiforme dotata di massa (Approssimazione di Born-Oppenheimer). Solo il nucleo  ${}^1\text{H}$  presenta apprezzabili proprietà ondulatorie (effetto tunnel).
- $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  si può riscrivere come  $\Delta x \Delta v \geq \hbar/(2m)$ .
- In questo schema possiamo studiare l'elettrone tramite la sua funzione d'onda stazionaria nel campo del nucleo.

# Atomo di idrogeno

- Le funzioni d'onda di un singolo elettrone sottoposto al campo elettrostatico della carica nucleare (se  $Z=1$  atomo di idrogeno, se  $Z>1$  atomo idrogenoide) possono essere ricavate analiticamente (sotto ipotesi BO).
- La forma è determinata dai numeri quantici  $n, l, m$ .

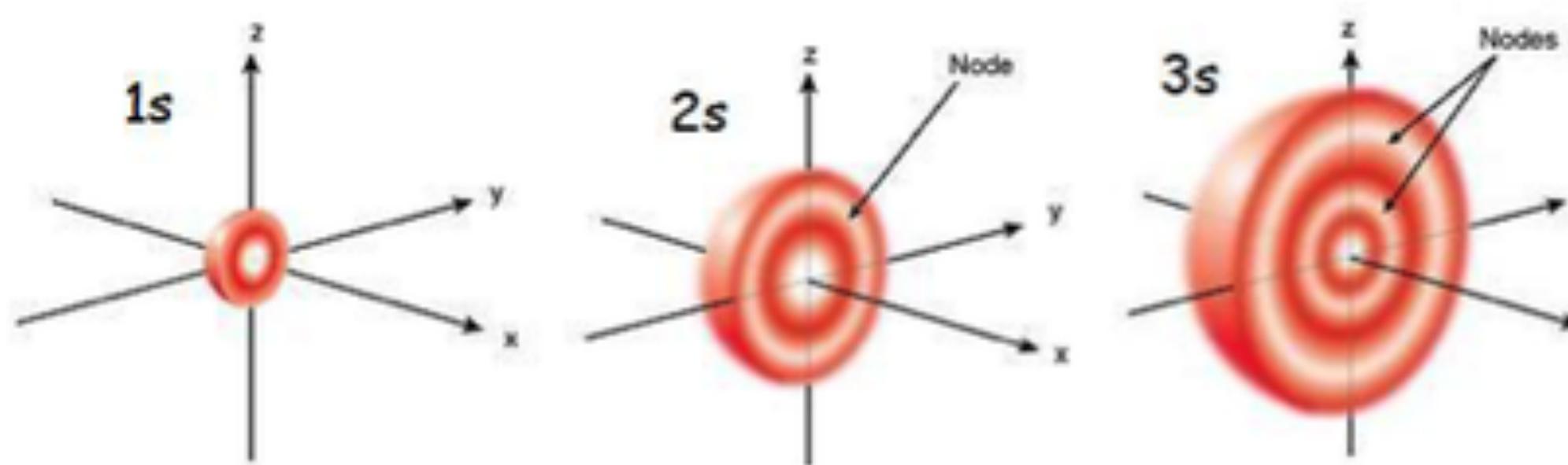
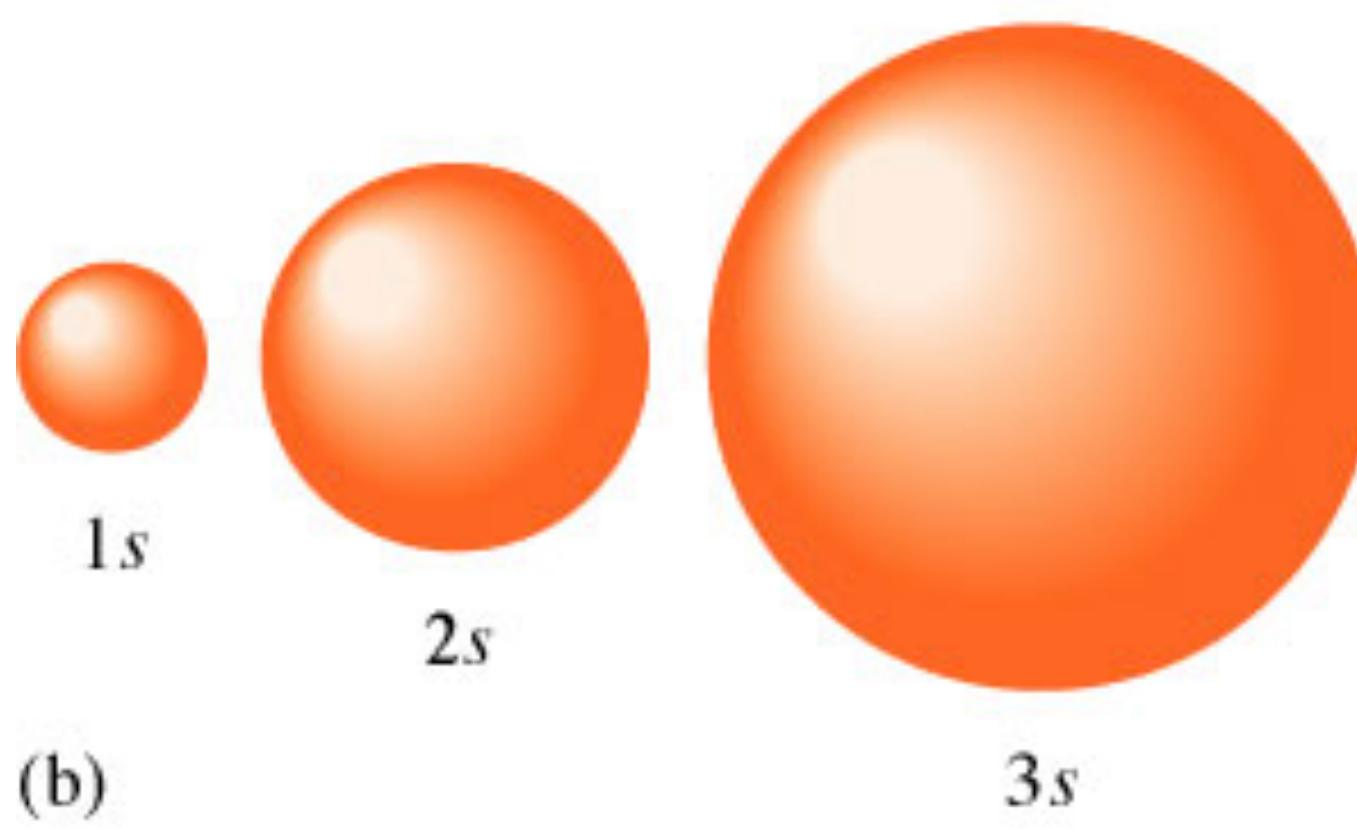
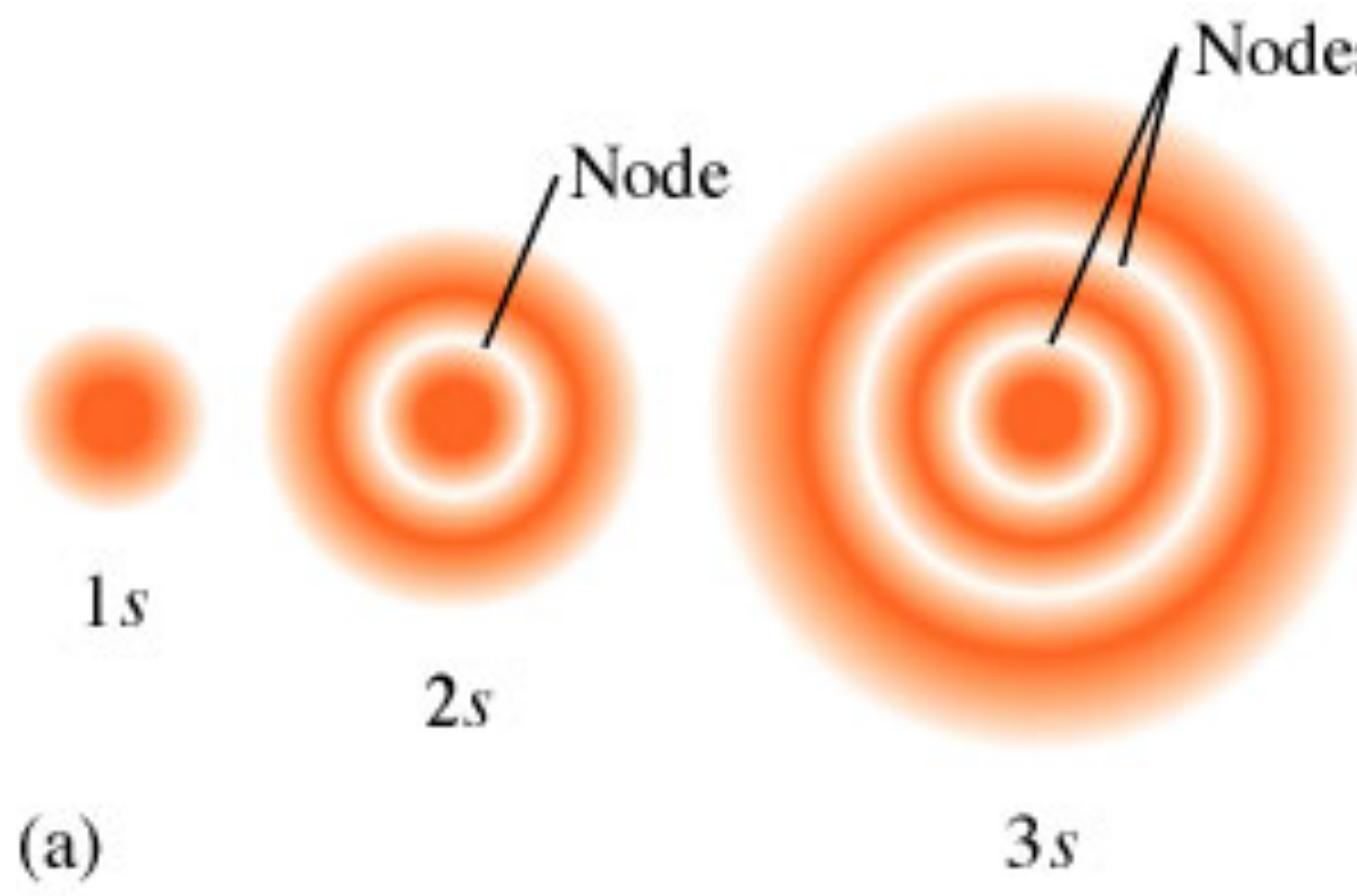
# Stato fondamentale di H

- $n=1, l=0, m=0$ . Stato 1s. Simmetria sferica.  $\varphi(\vec{r}) = \pi^{-\frac{1}{2}} a_0^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$



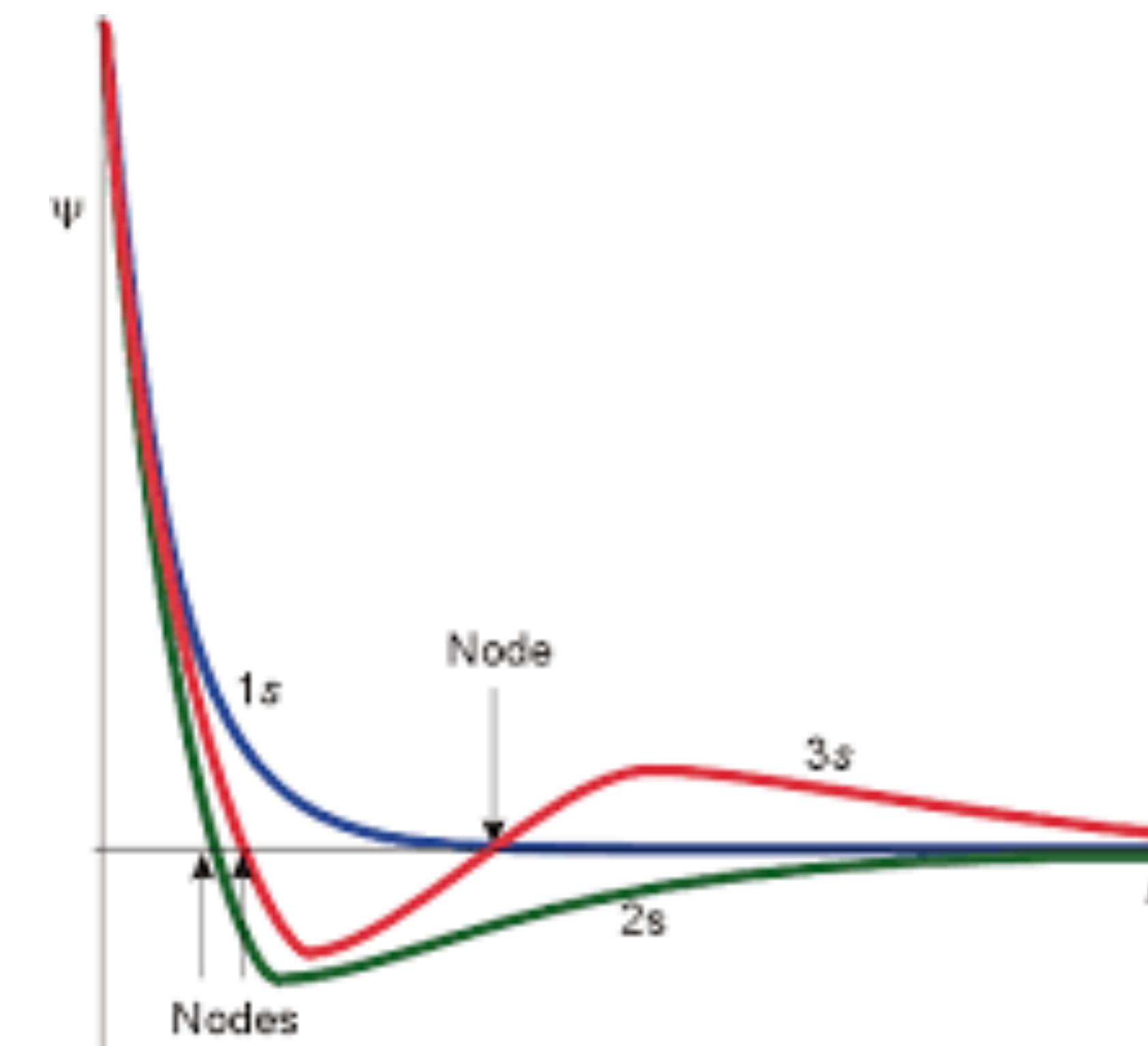
# Stato fondamentale di H

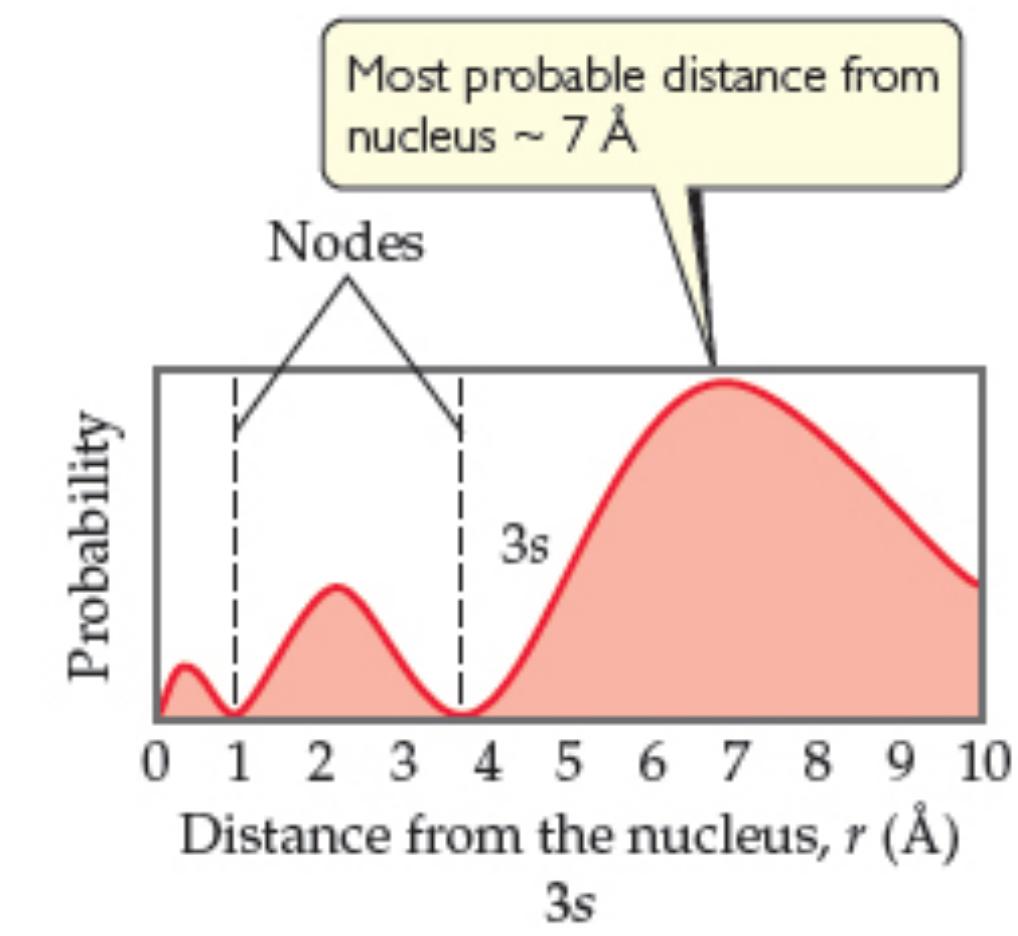
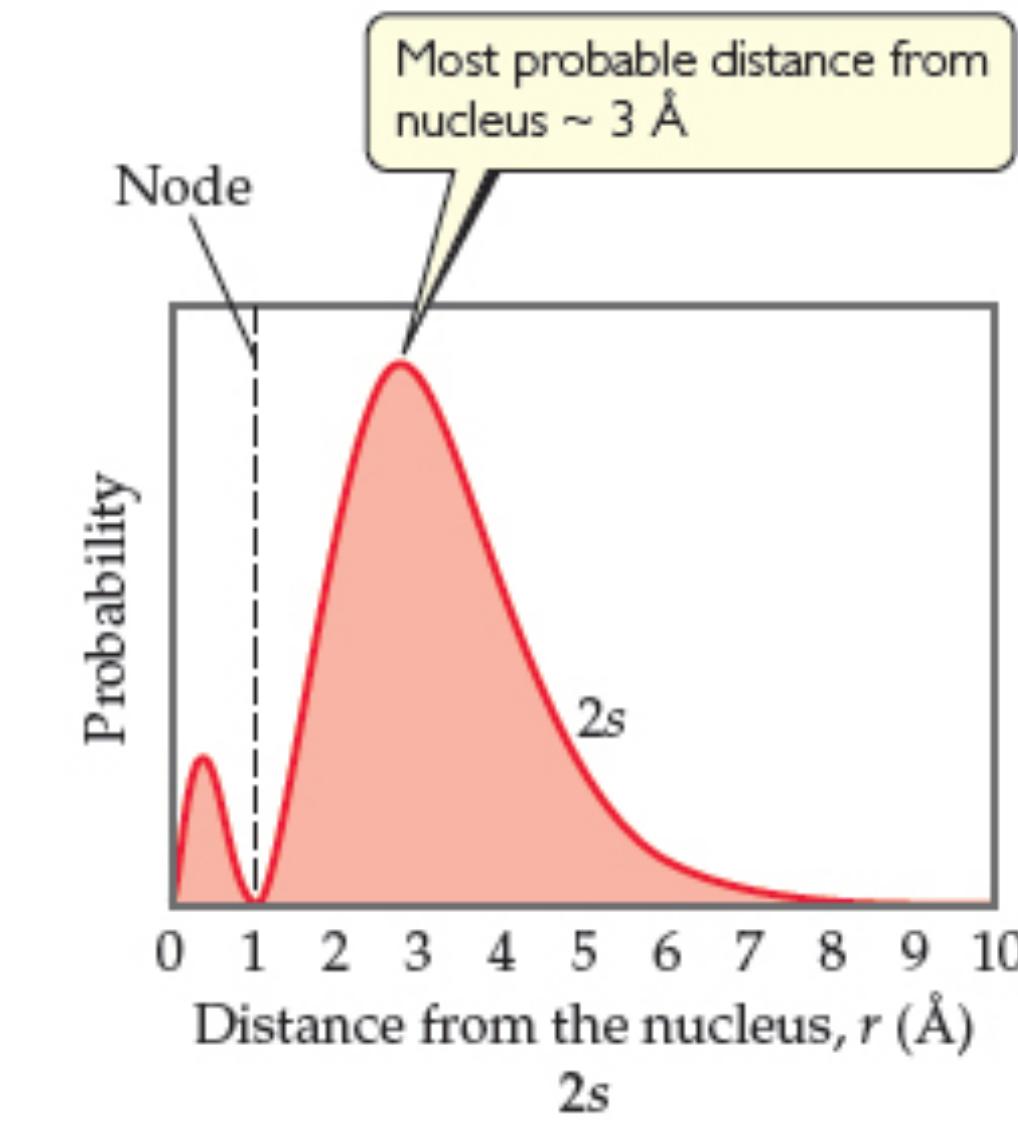
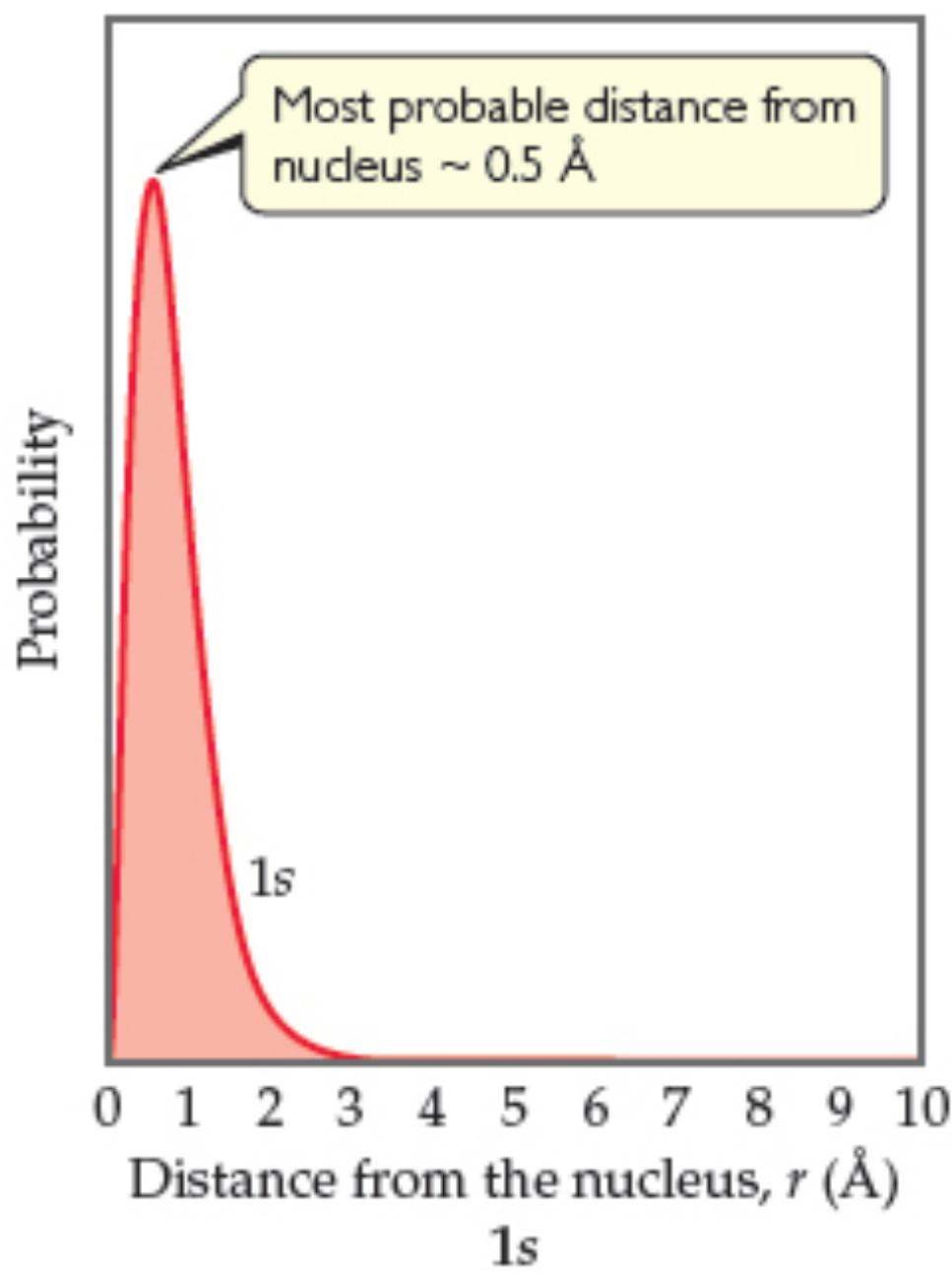
- n: numero quantico principale: collegato all' energia:  $E_n = -\frac{Z^2 R}{n^2}$ . Determina la forma radiale della funzione d' onda. n=1
- l: numero quantico azimutale o angolare: collegato al momento angolare  $L = \hbar l(l + 1)$ . Determina la forma angolare della funzione d'onda. Solo e solo per sistemi con un solo elettrone l'energia non dipende da l. l=0, L=0, simmetria sferica.
- m: numero quantico magnetico: funzioni d' onda con lo stesso n e l e diverso m sono uguali solo orientate diversamente nello spazio. L'energia dipende da m solo in presenza di campi magnetici. m=0 una sfera ha solo un modo per orientarsi.
- s: numero quantico di spin. Collegato al momento magnetico dell'elettrone: s=-1/2, +1/2. Non è un concetto semplice, ci torneremo (e ci tornerete in altri corsi).



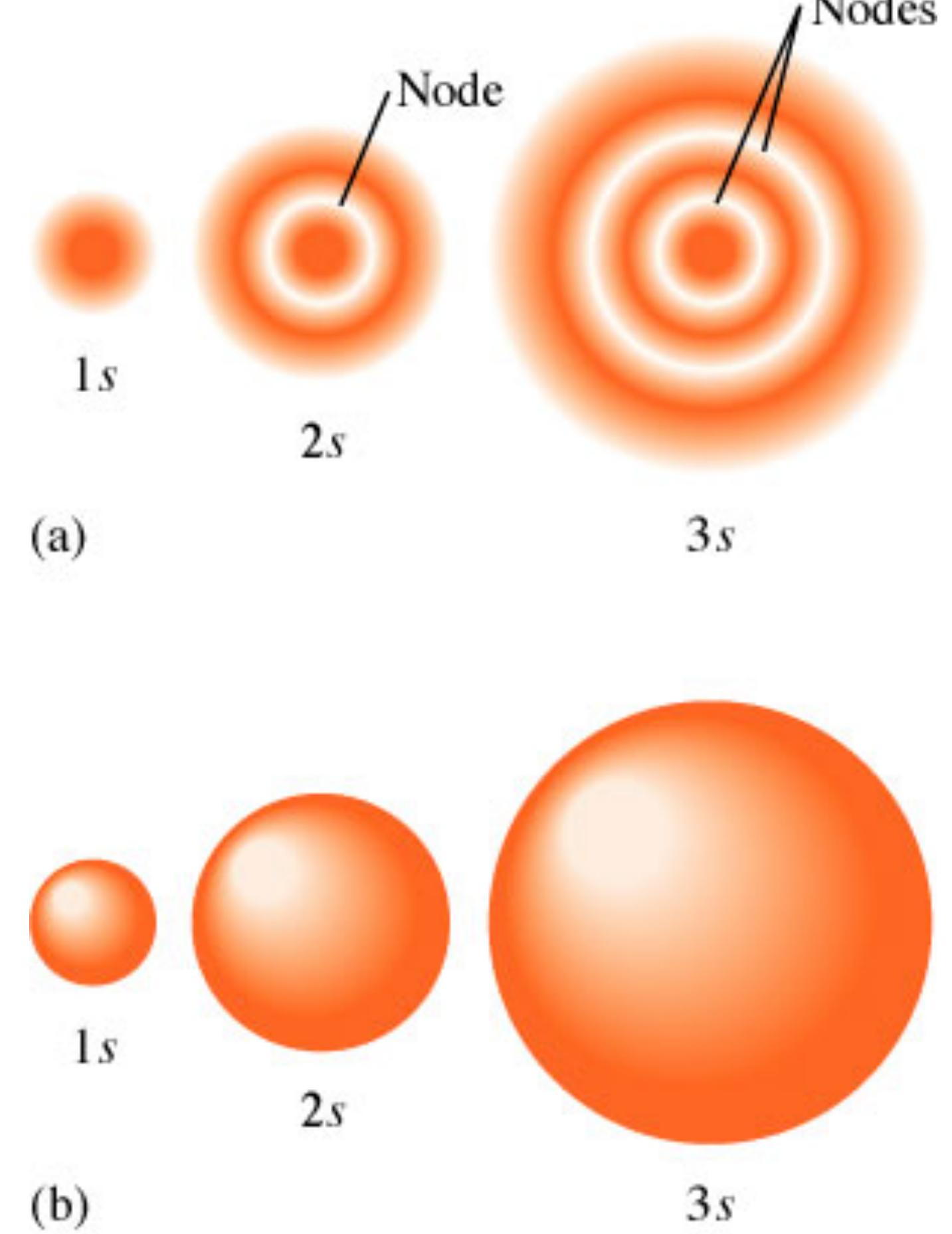
**T A B L E 5.2**  
Angular and Radial Parts of Wave Functions for One-Electron Atoms

	Angular Part $Y(\theta, \phi)$	Radial Part $R_{n\ell}(r)$
1s	$\ell = 0 \left[ Y_s = \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$	$R_{1s} = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-\sigma)$
2s		$R_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \sigma) \exp(-\sigma/2)$
3s		$R_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2) \exp(-\sigma/3)$





	$n$	$l$	$m$	$s$
1s	1	0	0	$\pm 1/2$
2s	2	0	0	$\pm 1/2$
3s	3	0	0	$\pm 1/2$



**$n-1$  nodi**

# Orbitali 2p:

Angular Part  $Y(\theta, \phi)$

$$\ell = 0 \quad Y_s = \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

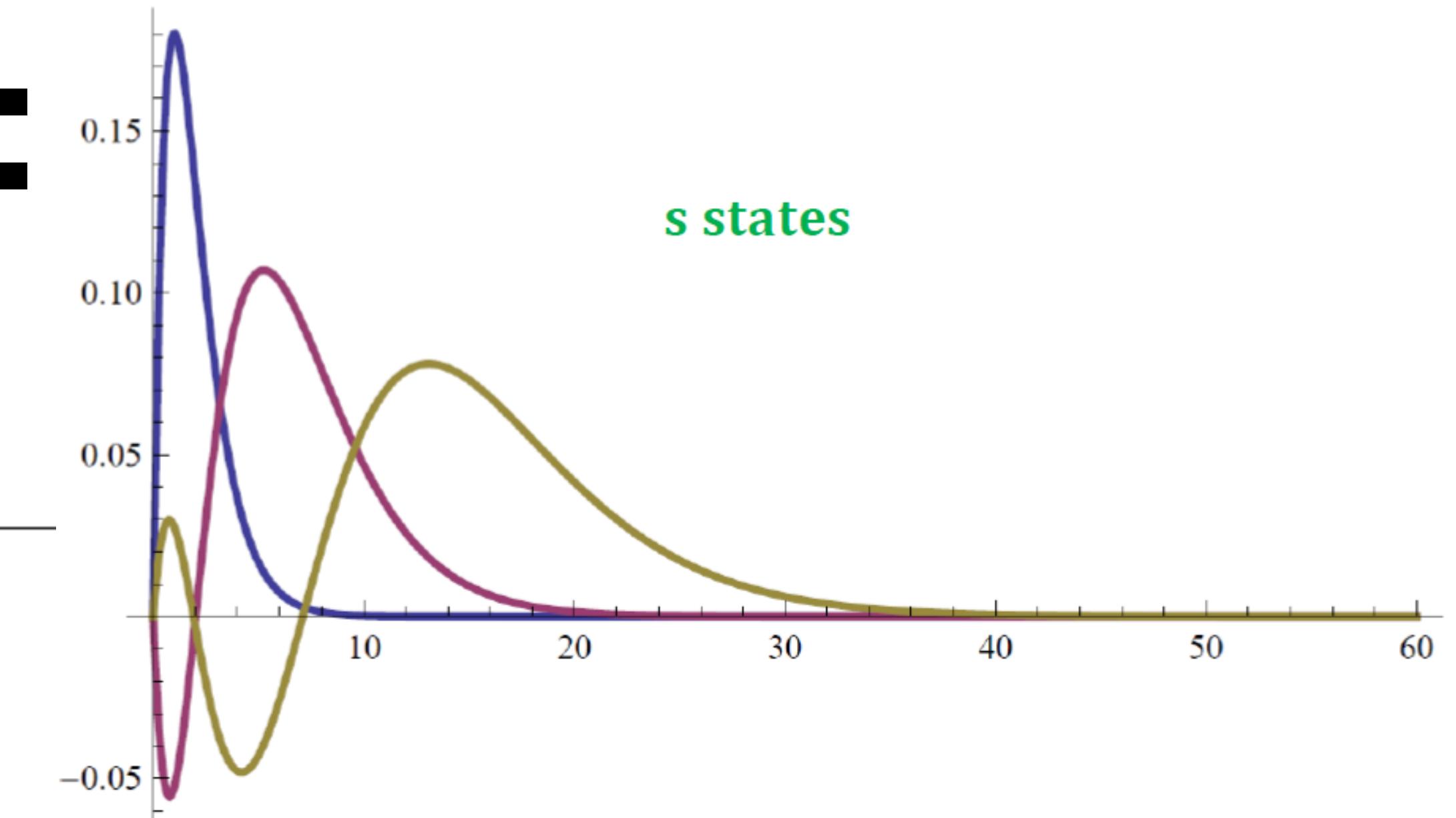
$$\ell = 1 \quad \begin{cases} Y_{p_x} = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi \\ Y_{p_y} = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi \\ Y_{p_z} = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta \end{cases}$$

Radial Part  $R_{n\ell}(r)$

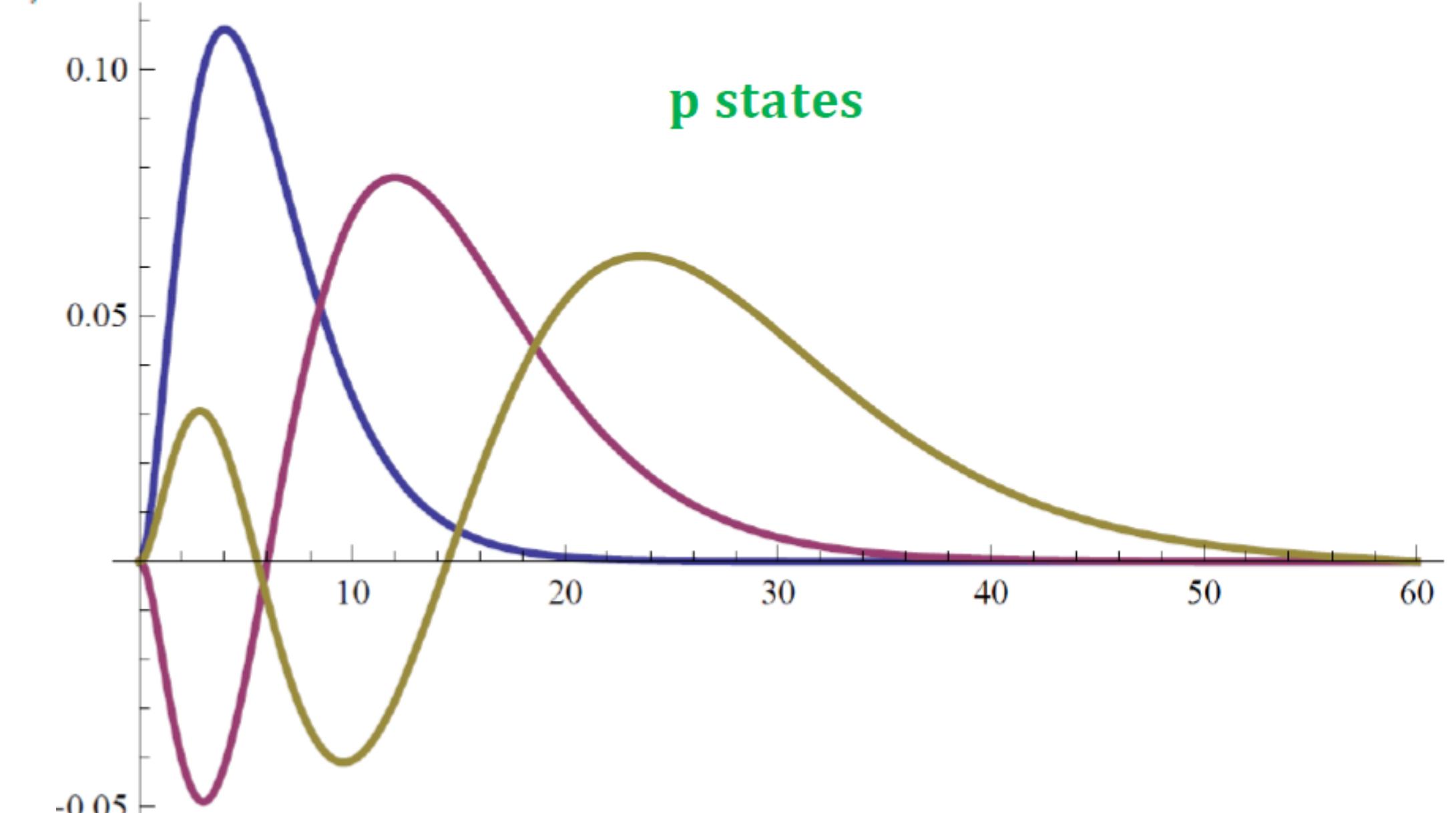
$$R_{1s} = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-\sigma)$$

$$R_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \sigma) \exp(-\sigma/2)$$

$$R_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2) \exp(-\sigma/3)$$



s states

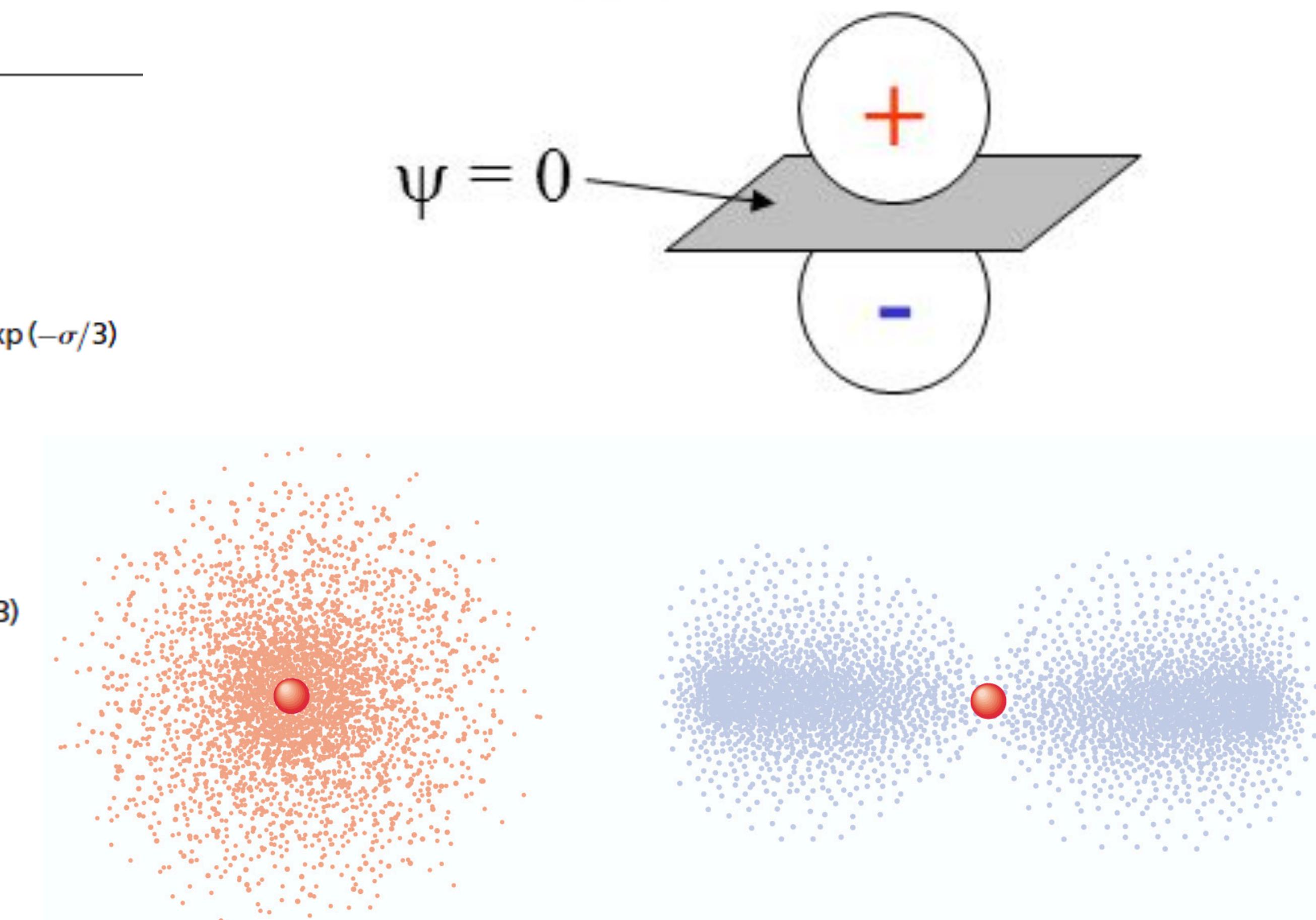


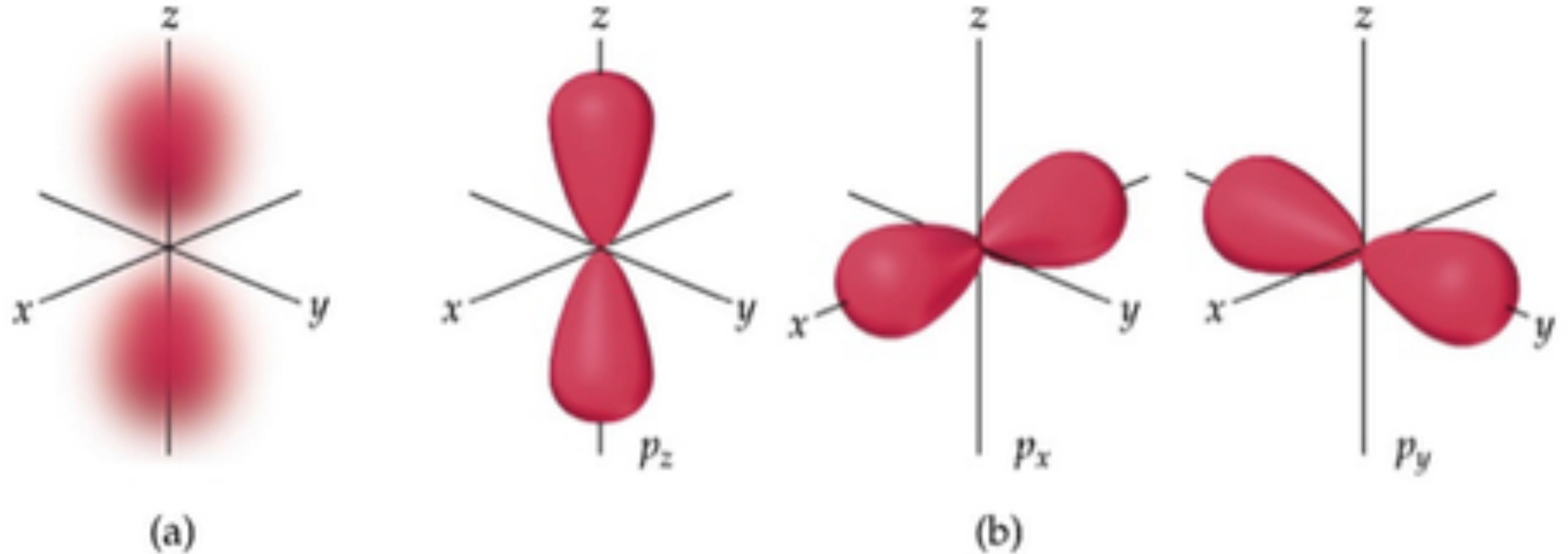
p states

$r/a_B$

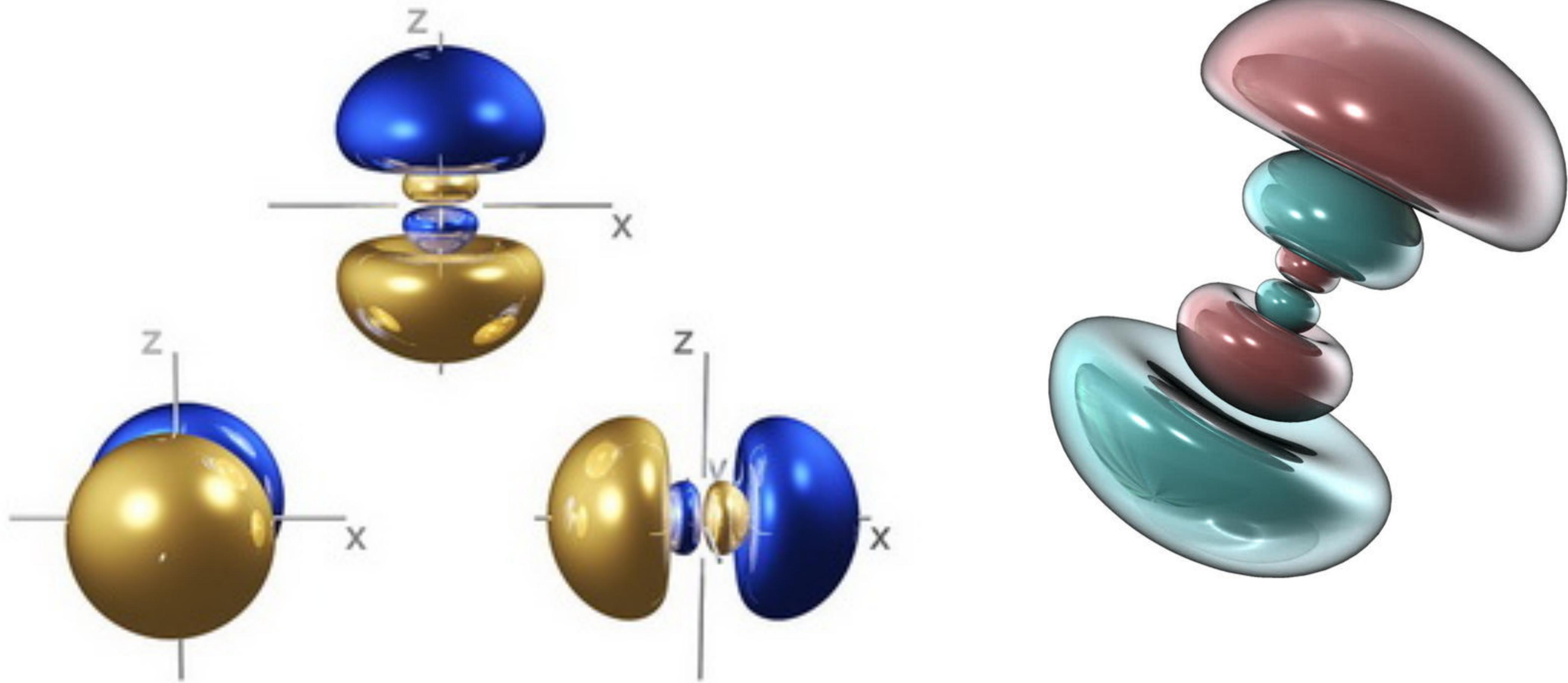
# Orbitali 2p: n=1, l=1

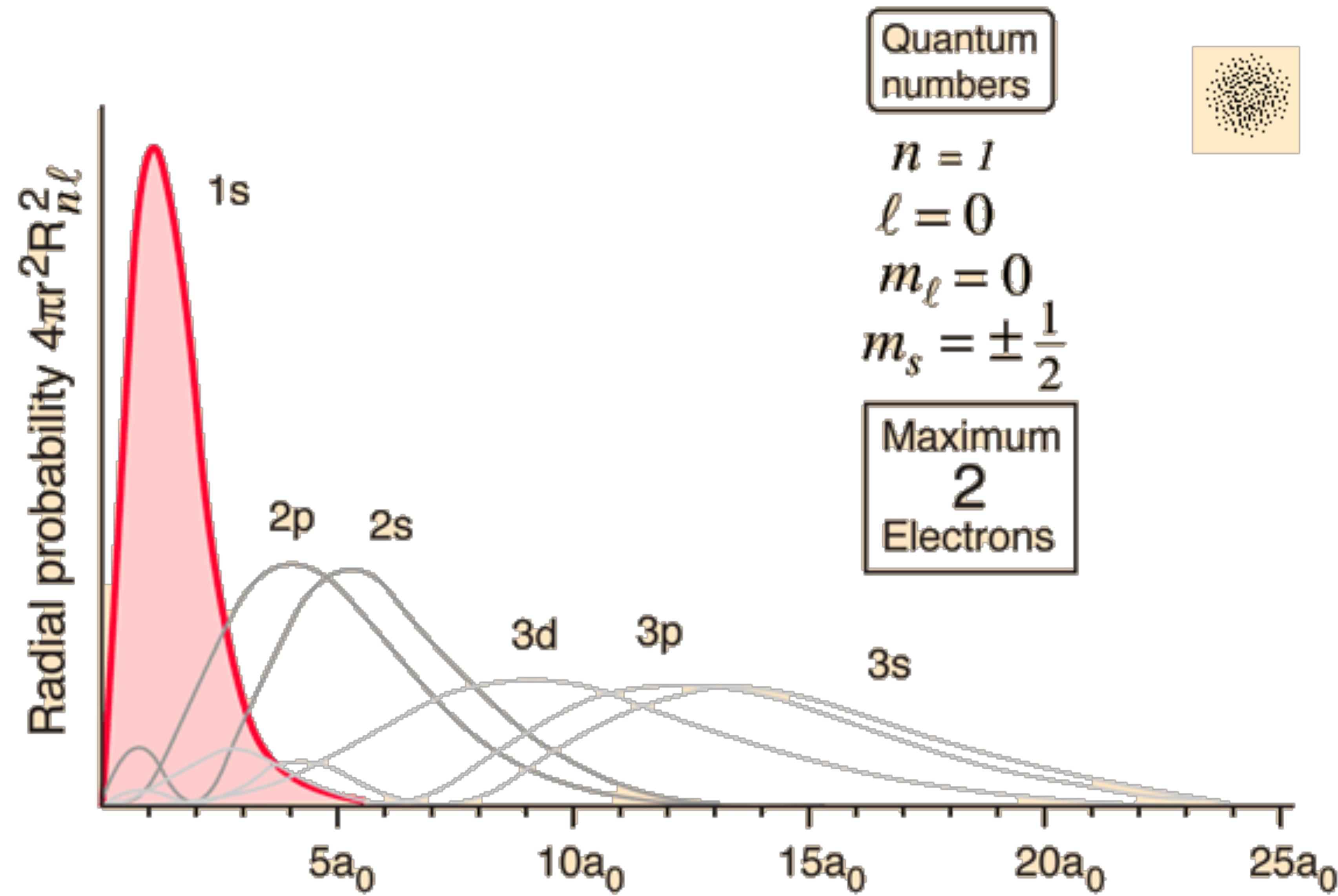
Angular Part $Y(\theta, \phi)$	Radial Part $R_{n\ell}(r)$
$\ell = 0 \left\{ Y_s = \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$	$R_{1s} = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-\sigma)$
	$R_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \sigma) \exp(-\sigma/2)$
	$R_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2) \exp(-\sigma/3)$
$\ell = 1 \left\{ \begin{array}{l} Y_{p_x} = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi \\ Y_{p_y} = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi \\ Y_{p_z} = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta \end{array} \right.$	$R_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \sigma \exp(-\sigma/2)$
	$R_{3p} = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (6\sigma - \sigma^2) \exp(-\sigma/3)$



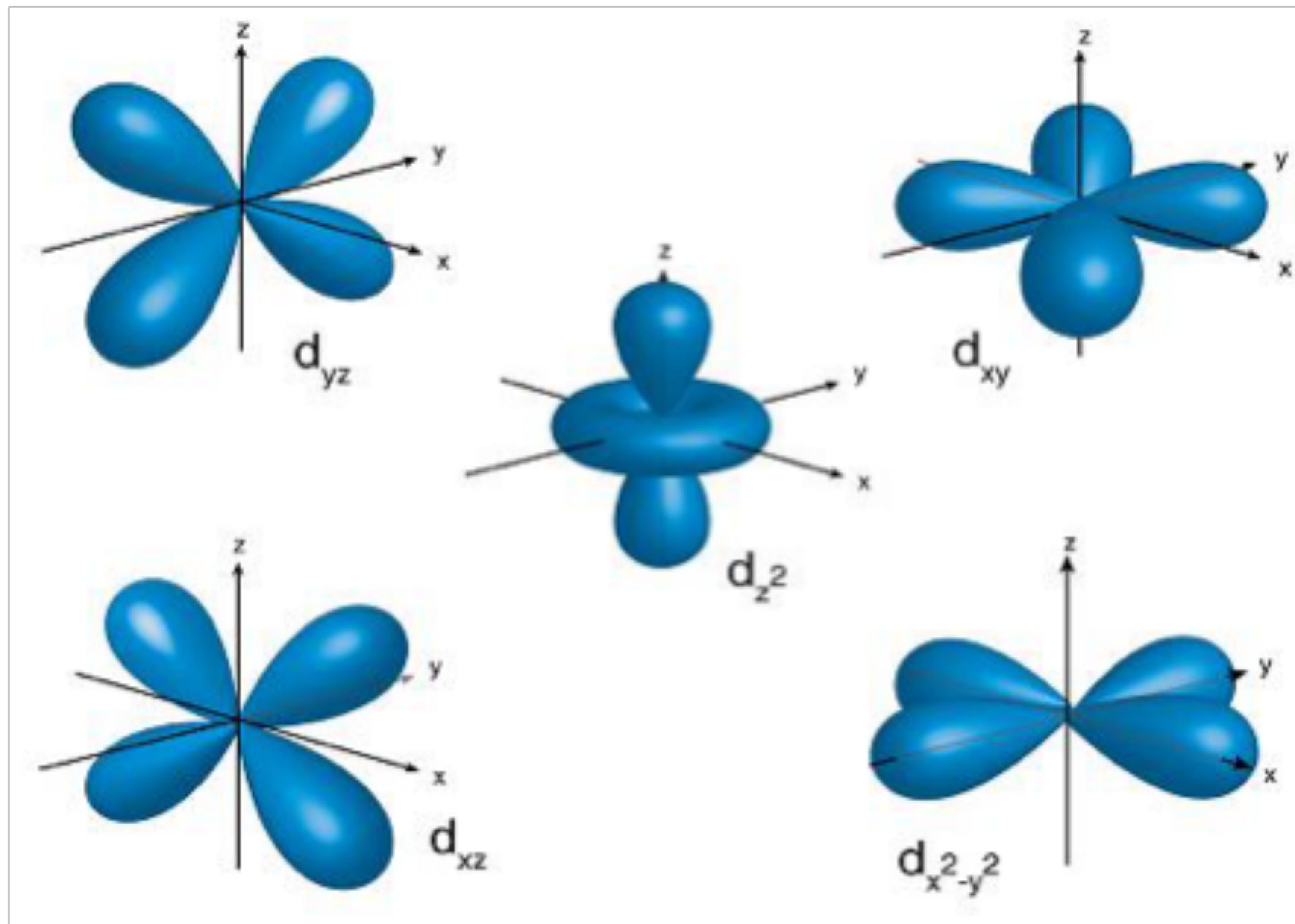


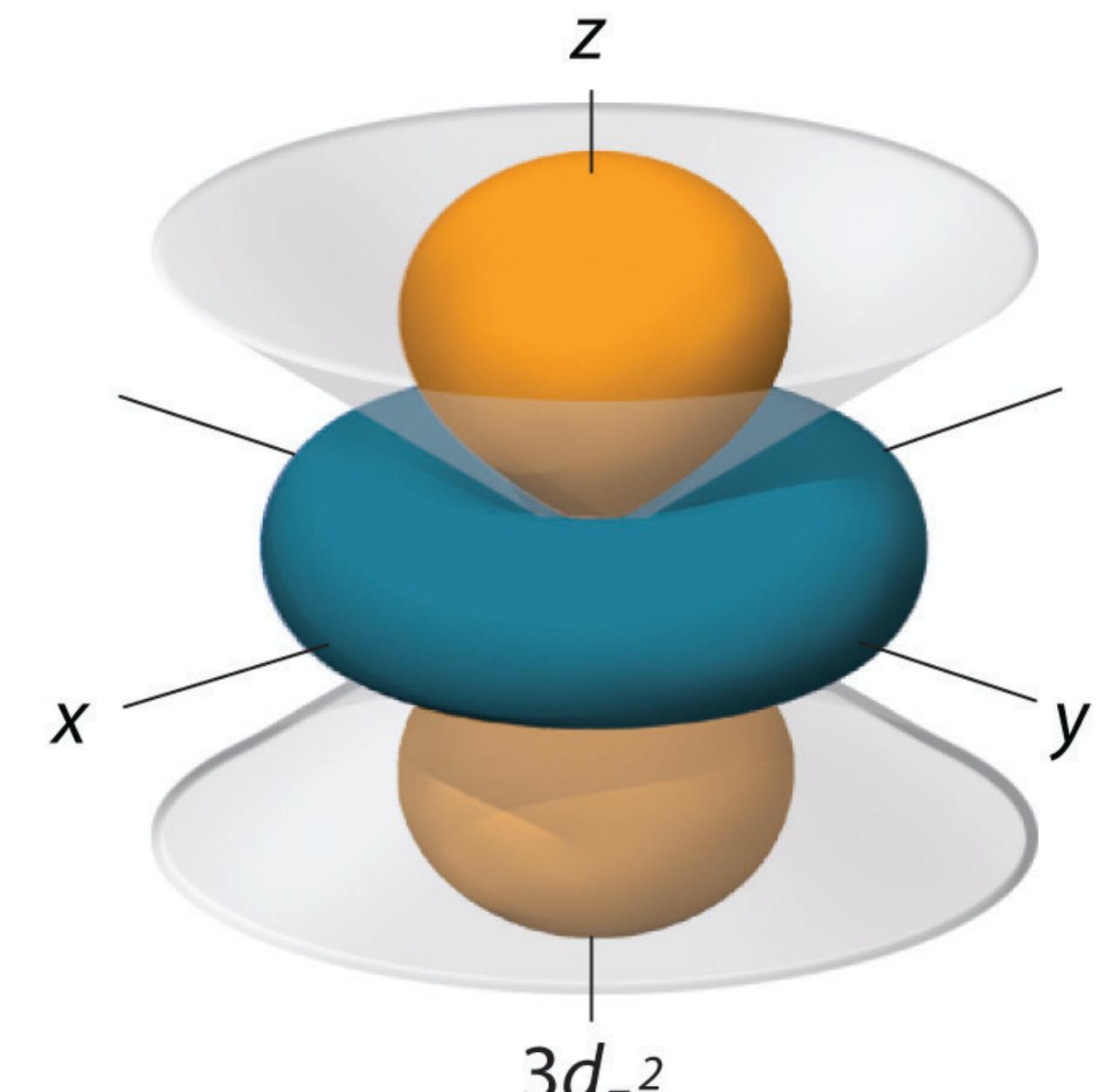
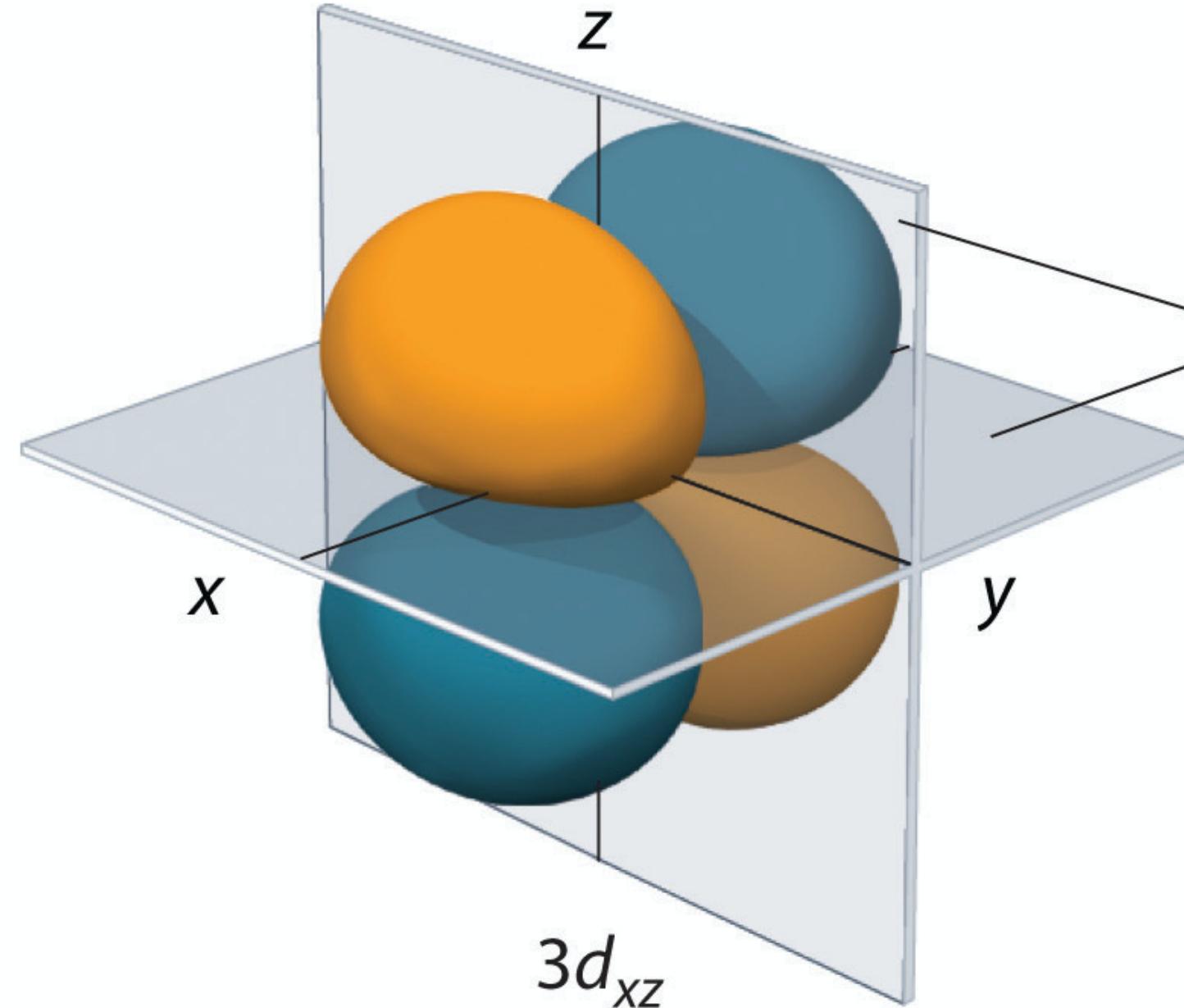
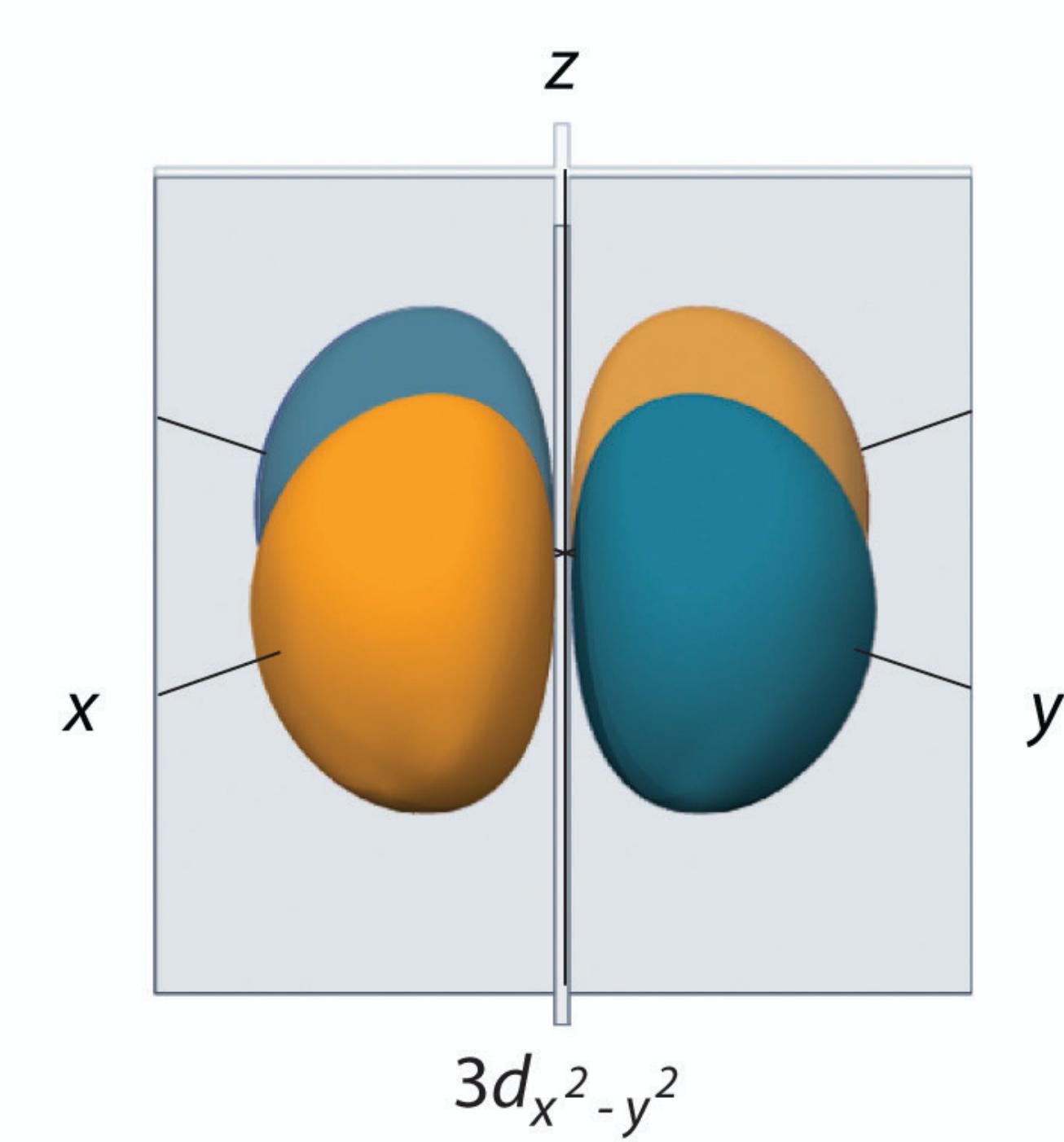
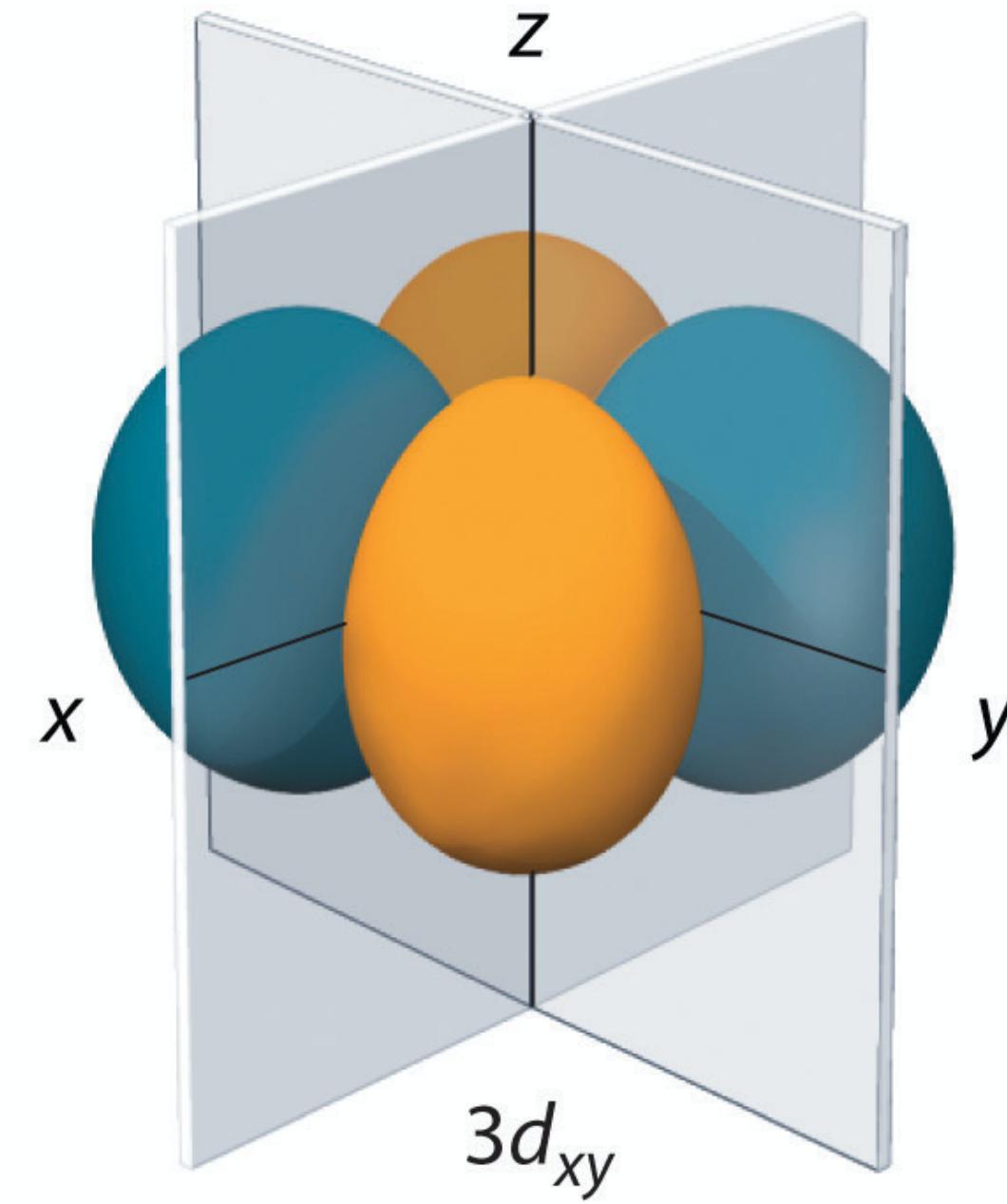
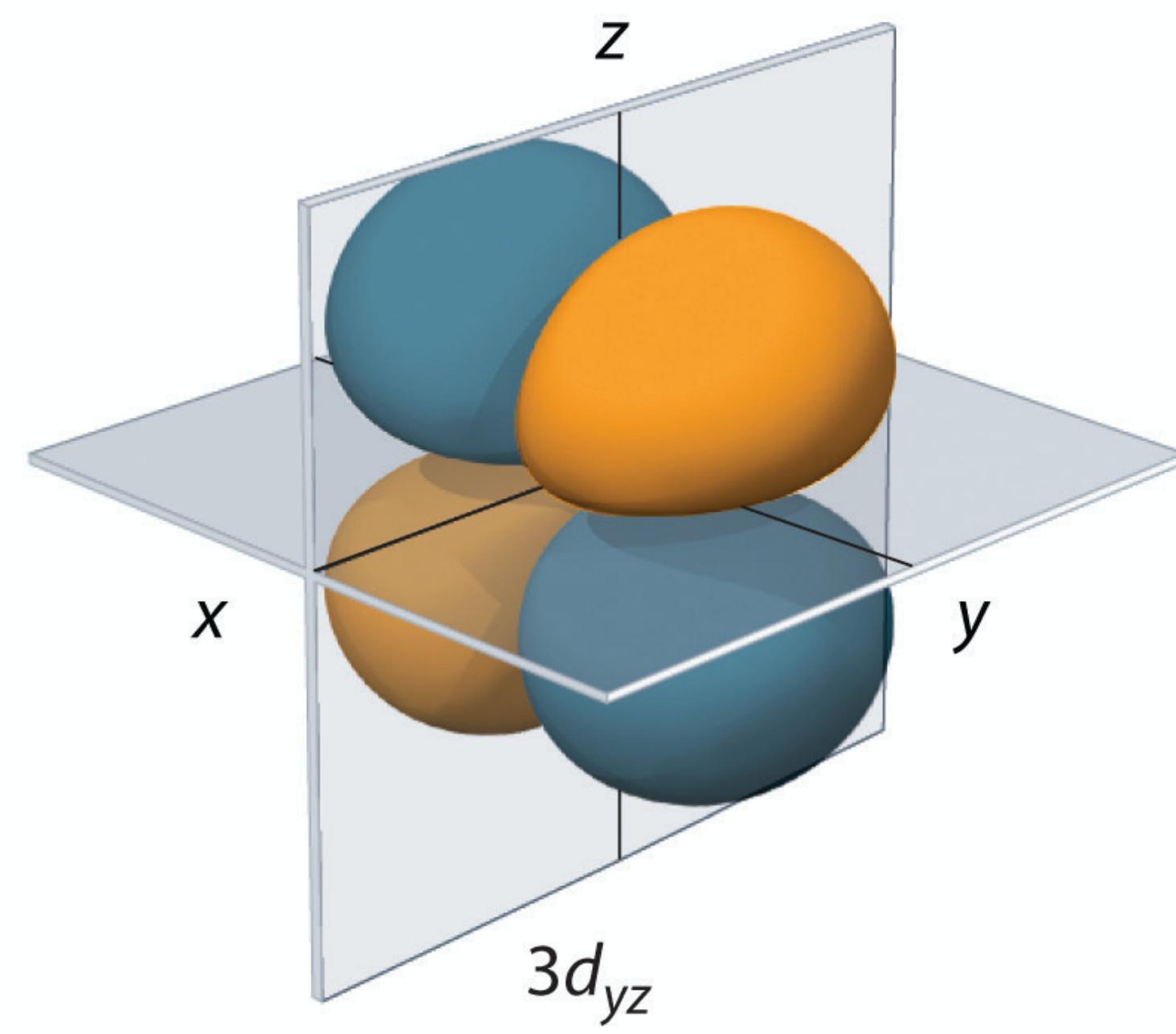
# Orbitali 3p



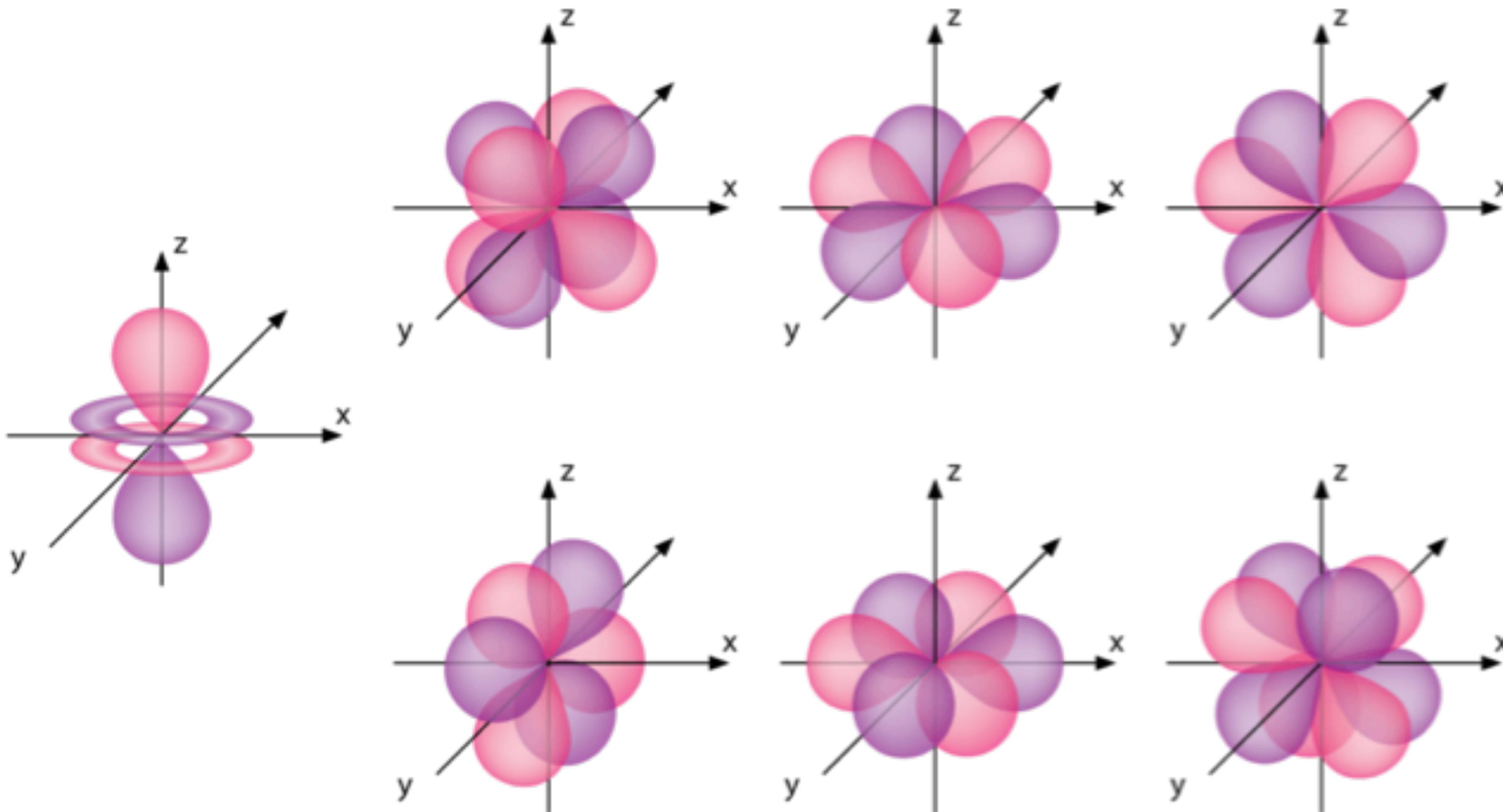


# Orbitali 3d n=3, l=2

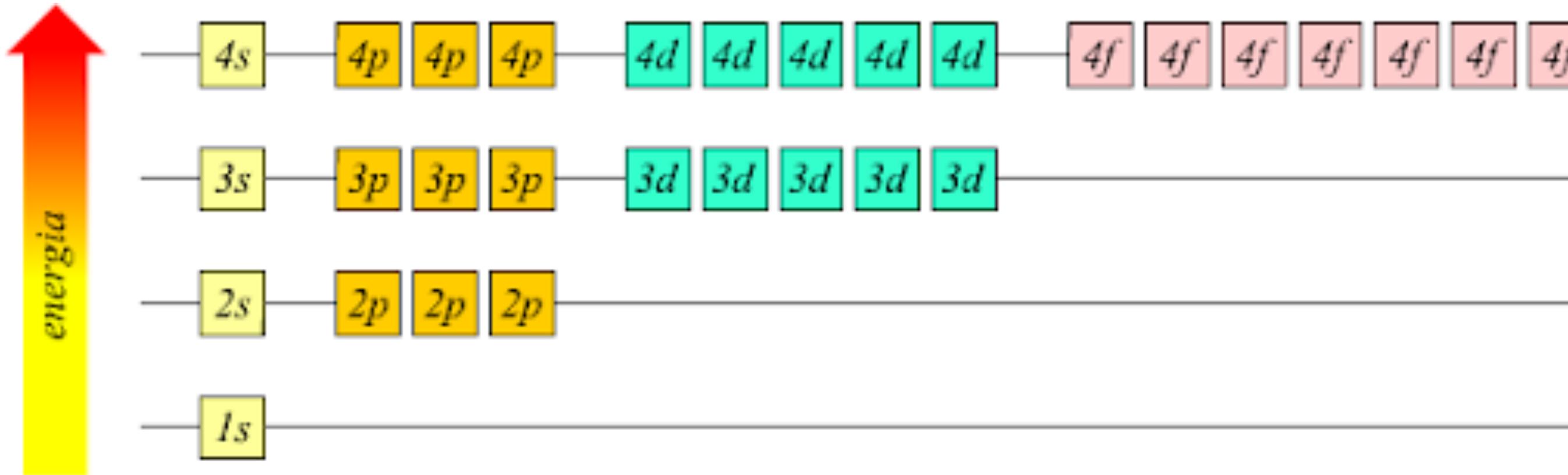


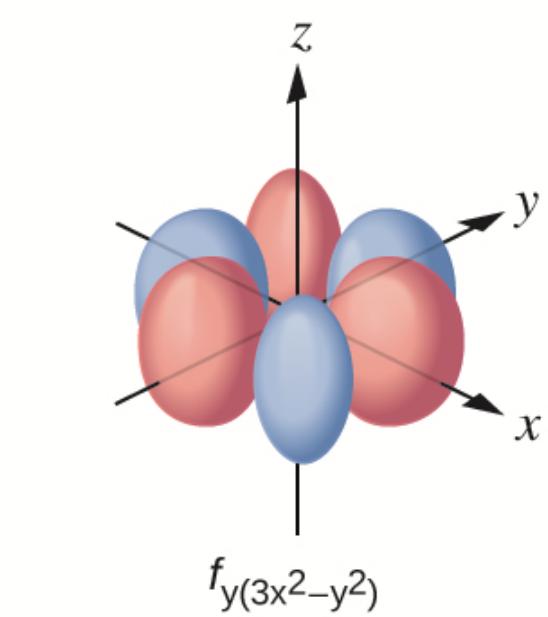
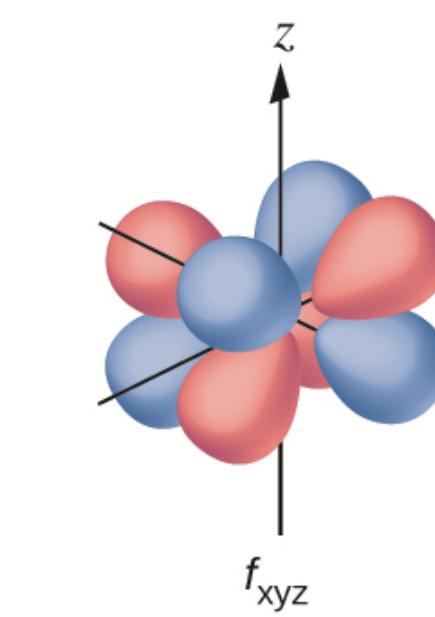
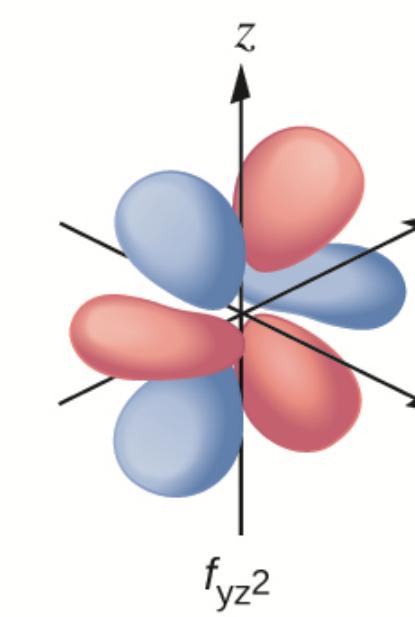
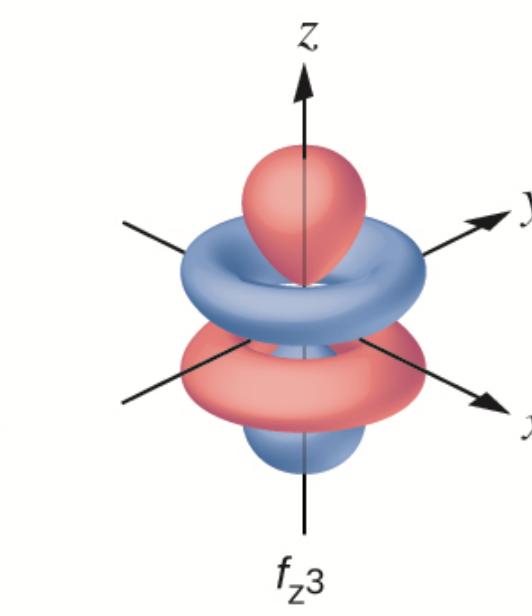
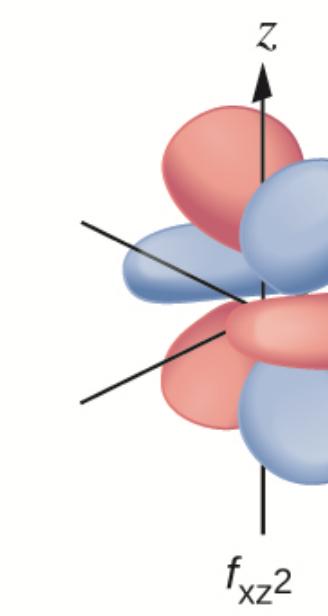
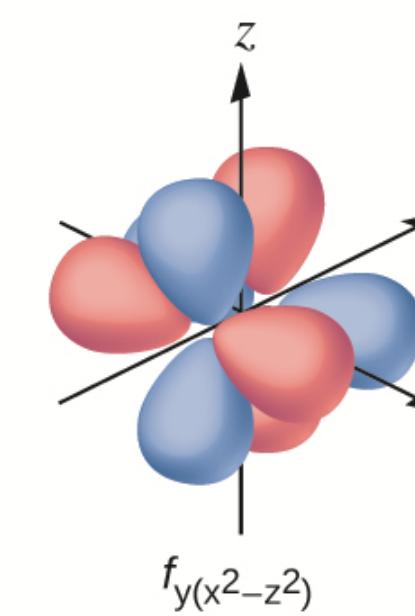
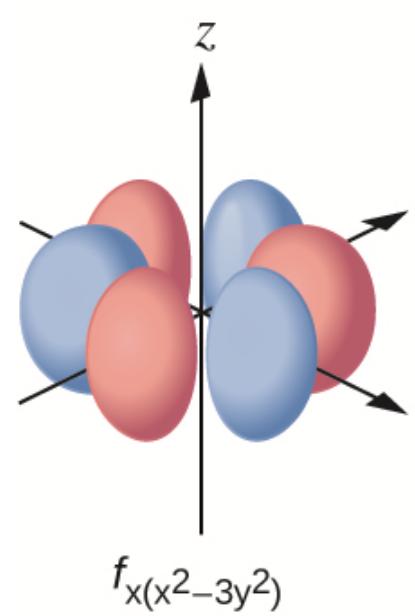
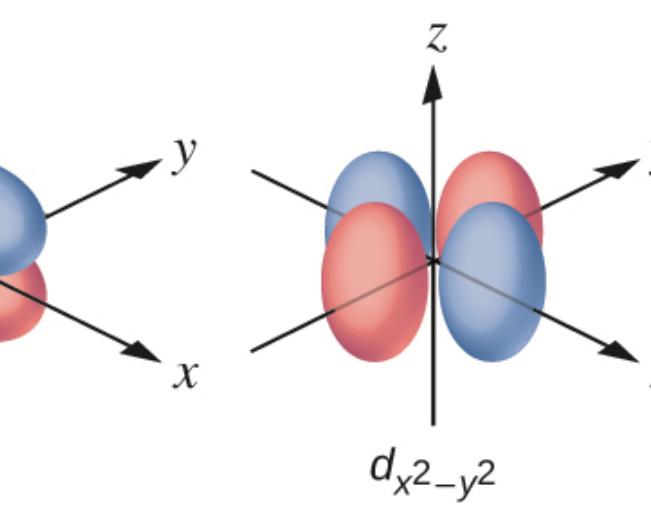
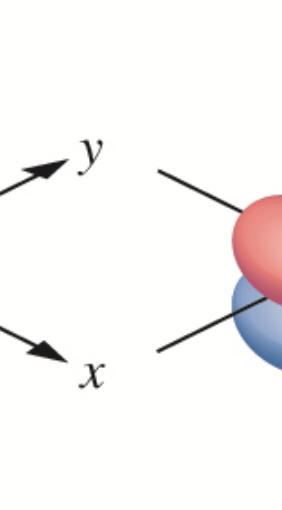
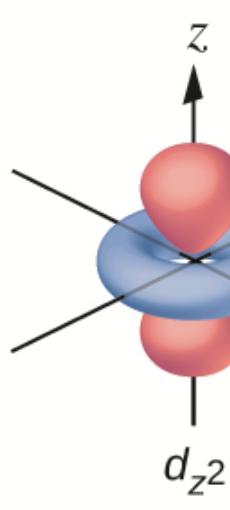
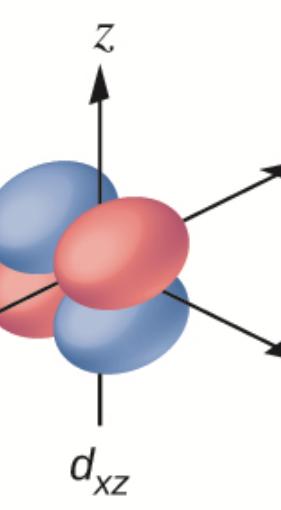
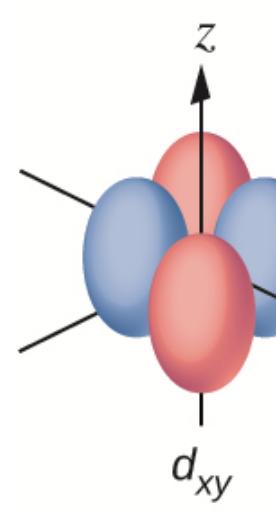
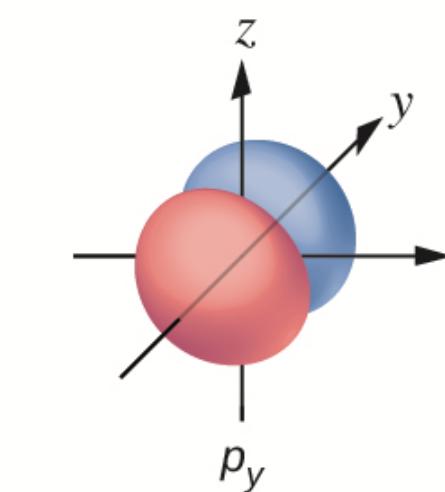
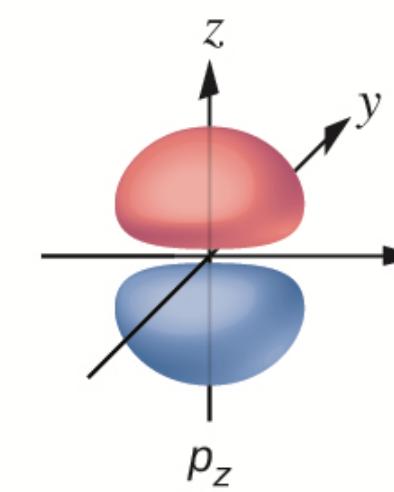
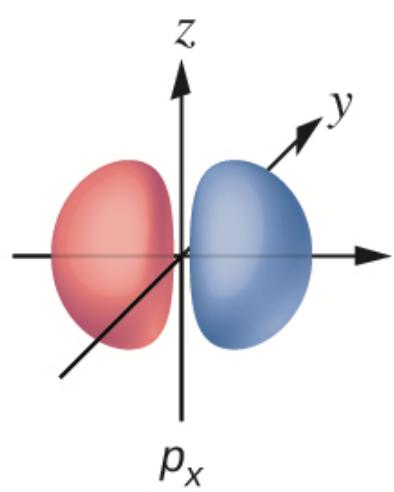
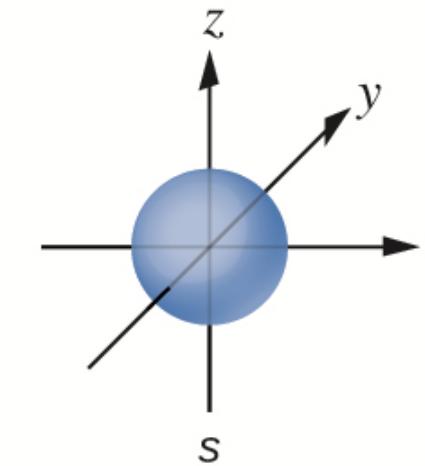


# Orbitali 4f n=4, l=3



	n	l	m	s
1s	1	0	0	$\pm 1/2$
2s	2	0	0	$\pm 1/2$
2p	2	1	-1,0,+1	$\pm 1/2$
3s	3	0	0	$\pm 1/2$
3p	3	1	-1,0,+1	$\pm 1/2$
3d	3	2	-2,-1,0,+1,+2	$\pm 1/2$
4s	4		0	$\pm 1/2$
4p	4		-1,0,+1	$\pm 1/2$
4d	4		-2,-1,0,+1,+2	$\pm 1/2$
4f	4		-3,-2,-1,0,+1,+2,+3	$\pm 1/2$





$n$	$l$	$m$	$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta$
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{8\sqrt{3\pi}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}a_0^{3/2}}\left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right)e^{-r/2a_0}$
3	1	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}a_0^{3/2}}\left(6 - \frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\cos\theta$
3	1	$\pm 1$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}a_0^{3/2}}\left(6 - \frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\sin\theta e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}\left(3\cos^2\theta - 1\right)$
3	2	$\pm 1$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$
3	2	$\pm 2$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$

