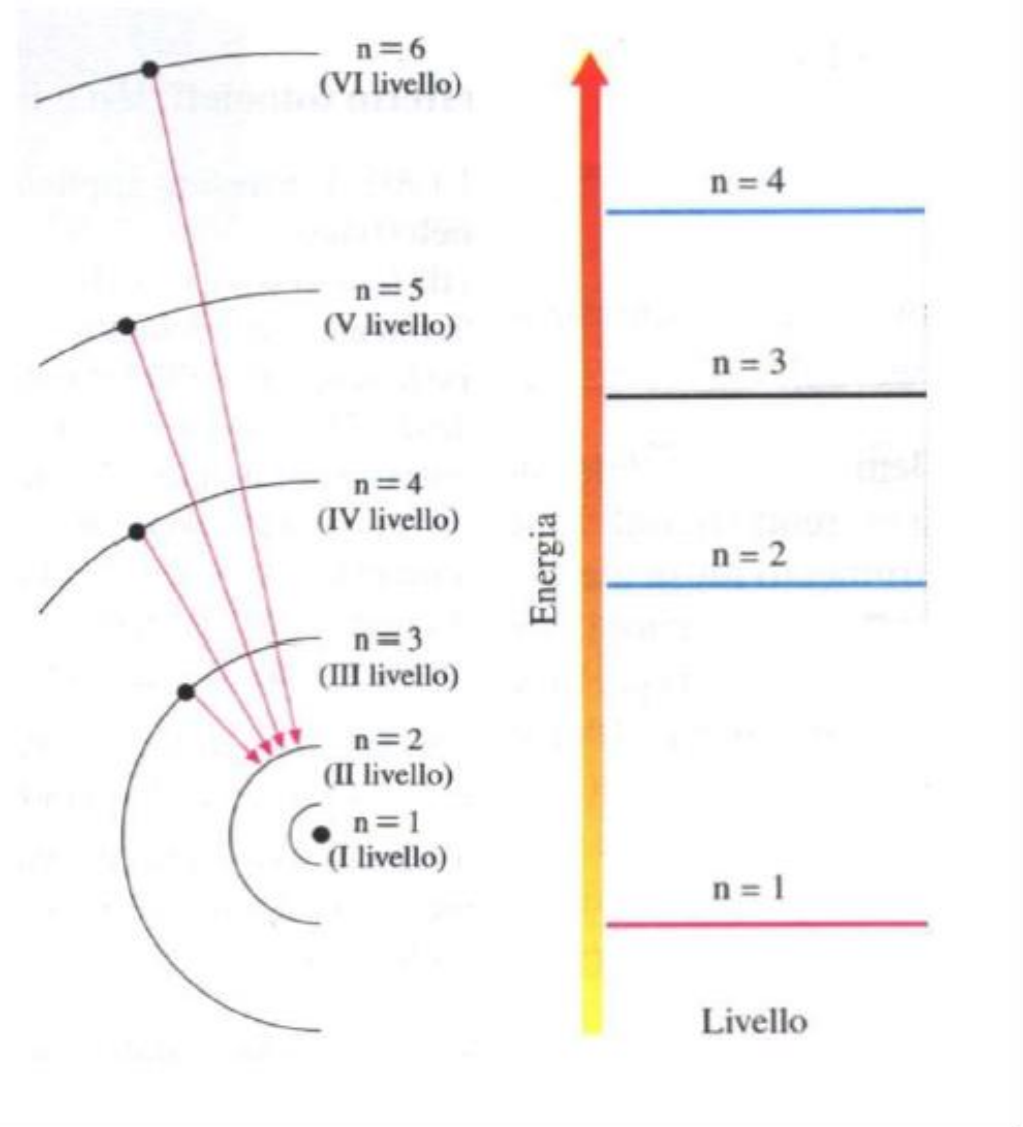
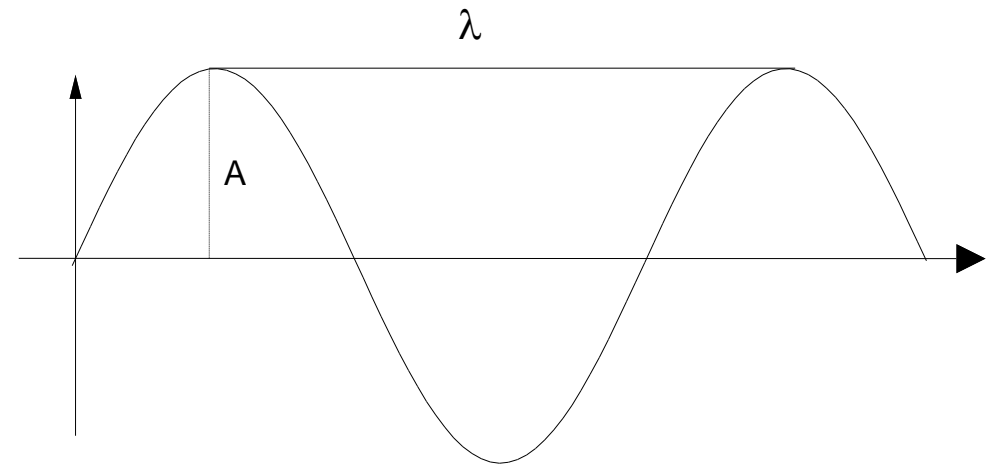


- Riepilogo modello quantistico
- Numeri quantici
- 2 elettroni per orbita (Pauli)



- Onda
- Natura corpuscolare e ondulatoria
- Orbitali
- Regola dell' "Aufbau" (costruzione configurazione elettronica)

## Onda

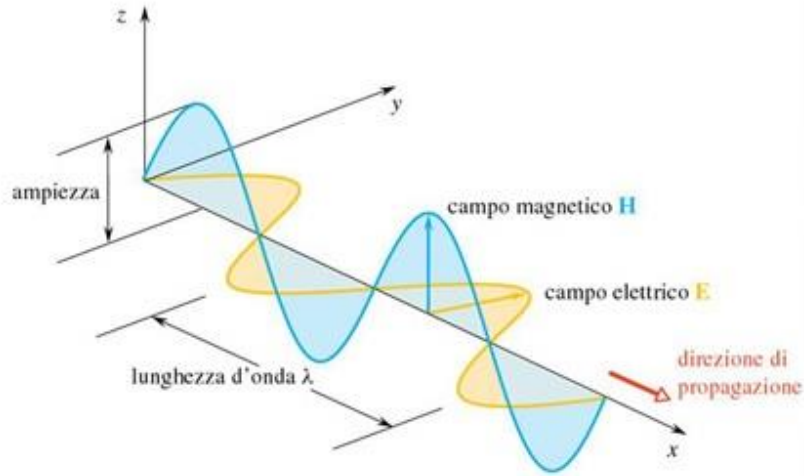


Lunghezza d'onda e Ampiezza

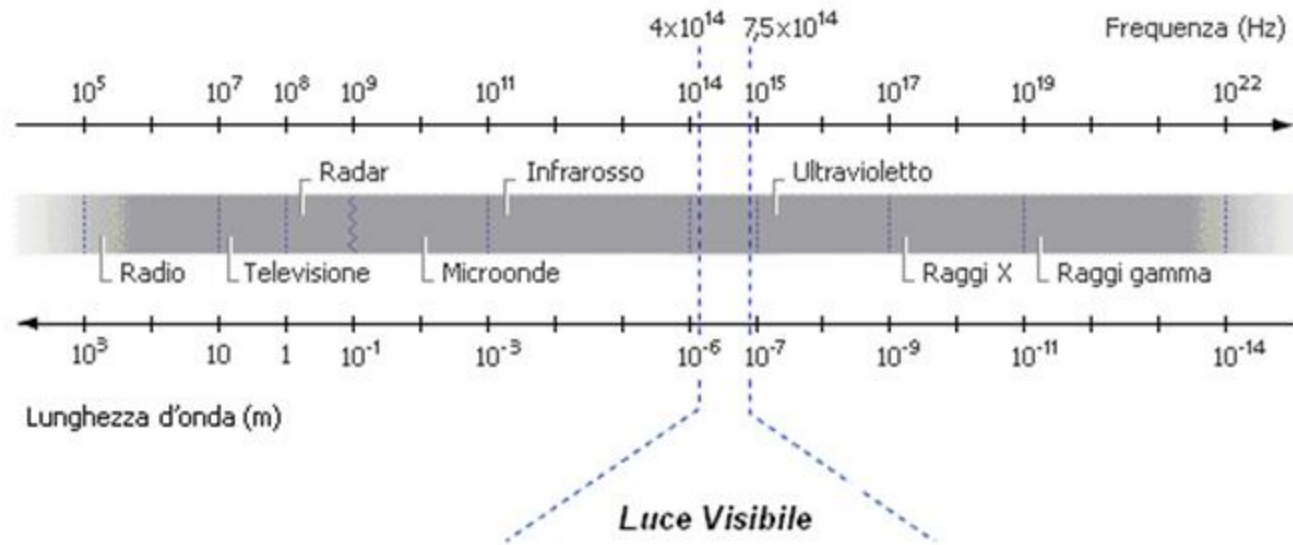
- $\lambda$  = lunghezza d'onda → distanza tra due max o min successivi
- A = ampiezza
- $\nu$  = frequenza → numero di oscillazioni in 1 sec.

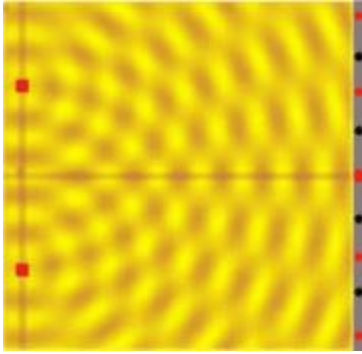
- $c$  = velocità di propagazione della luce nel vuoto ( $3 \times 10^8$  km/s)

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

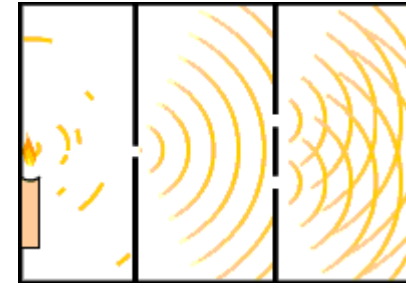


## Radiazione Elettromagnetica



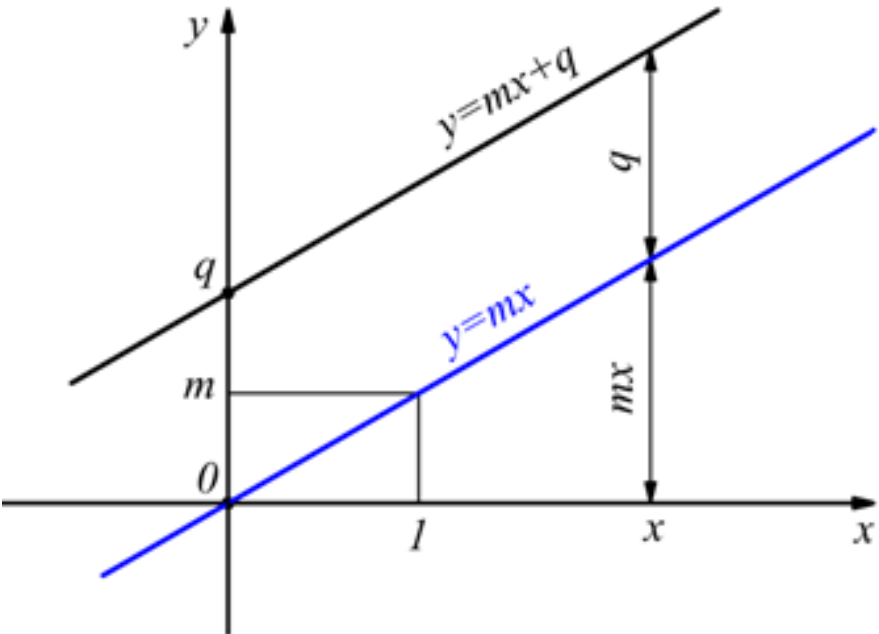


Esperimento di Young



Esperimento della doppia fenditura

natura corpuscolare e ondulatoria



### Equazione di Schroedinger

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

Equazione di Schroedinger indipendente dal tempo

Ci saranno diverse soluzioni  $\psi_n$  per diversi valori di  $E_n$

traiettoria precisa della particella → funzione d'onda  
 $\psi$  una funzione matematica funzione della posizione

- $\psi$     $\psi^2$    (analogia con il fotone)

Nel caso dell'onda luminosa la funzione d'onda  $\Psi$  definisce l'ampiezza dell'onda in funzione delle coordinate spaziali e l'intensità della radiazione in un punto è proporzionale al quadrato della funzione d'onda, cioè la probabilità che un fotone si trovi in un certo punto dello spazio è proporzionale a  $\Psi^2$ . Nel caso dell'onda associata all'elettrone nell'atomo, sebbene  $\Psi$  non abbia significato fisico, il suo quadrato  $\Psi^2$  rappresenta la **probabilità di trovare l'elettrone in una determinata posizione.**

- numeri quantici  $\rightarrow$  coefficienti equazione
- distanza dal nucleo (orbita)  $\rightarrow$  max. probabilità di trovare l'elettrone etc.

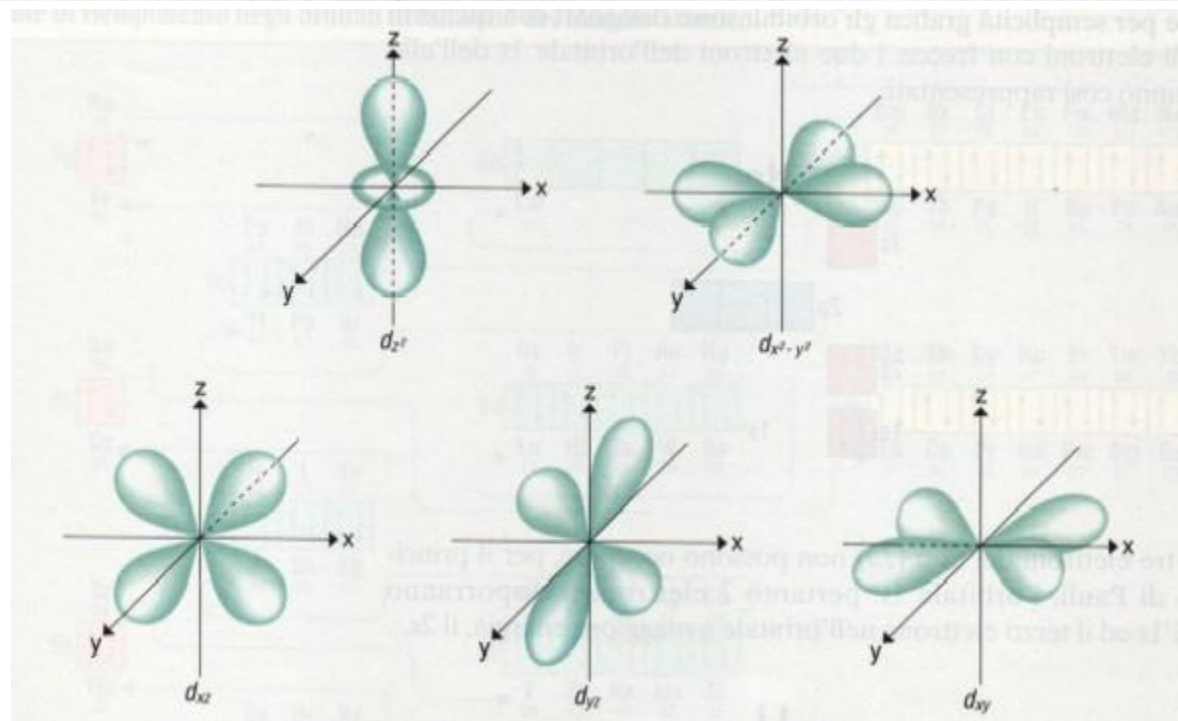
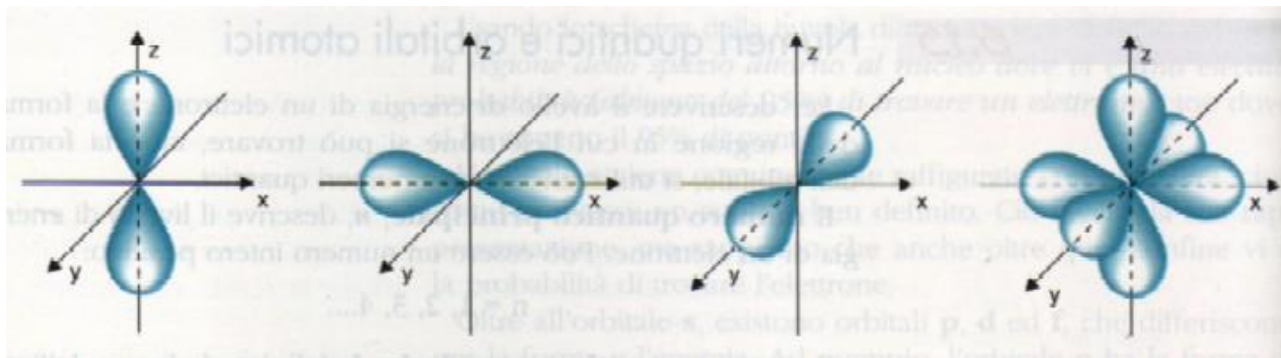
$l \rightarrow$  forma di  $\psi^2$  ( $\psi$ )

$l = 0$  orbitali s                      sempre a simmetria sferica (1 orbitale)

$l = 1$  orbitali p       $n \geq 2 \rightarrow l = 1 \rightarrow m = -1; m = 0; m = 1$  (3 orbitali)  
▪ isoenergetici (degeneri)

$l = 2$  orbitali d       $n \geq 3 \rightarrow l = 2 \rightarrow m = -2; m = -1; m = 0; m = 1; m = 2$  (5 orbitali)  
▪ isoenergetici (degeneri)

$l = 3$  orbitali f (7 orbitali)



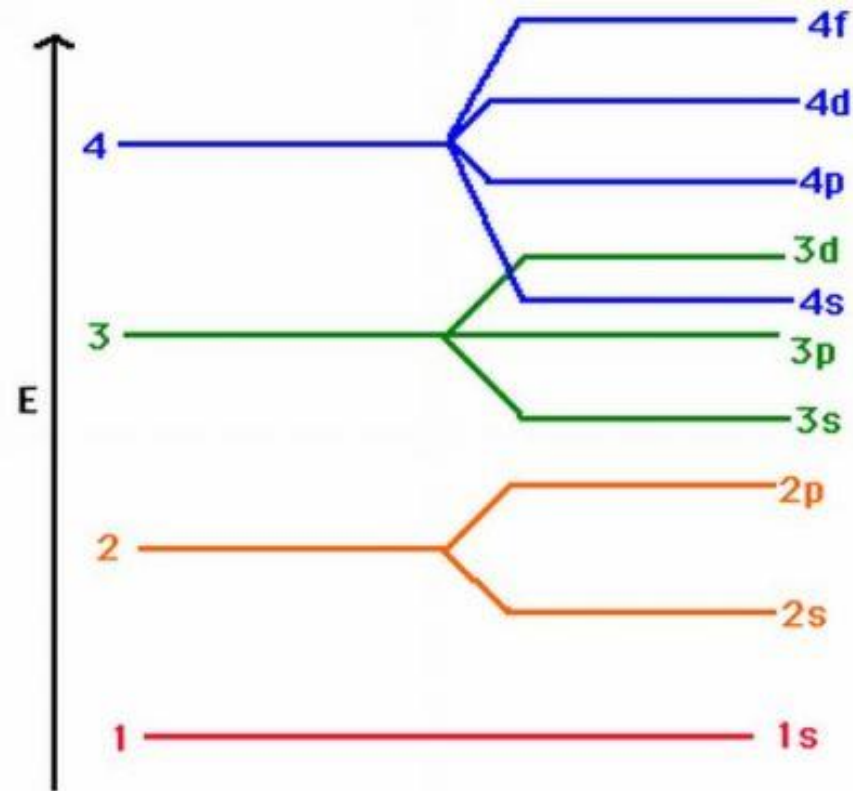


- Energia degli orbitali

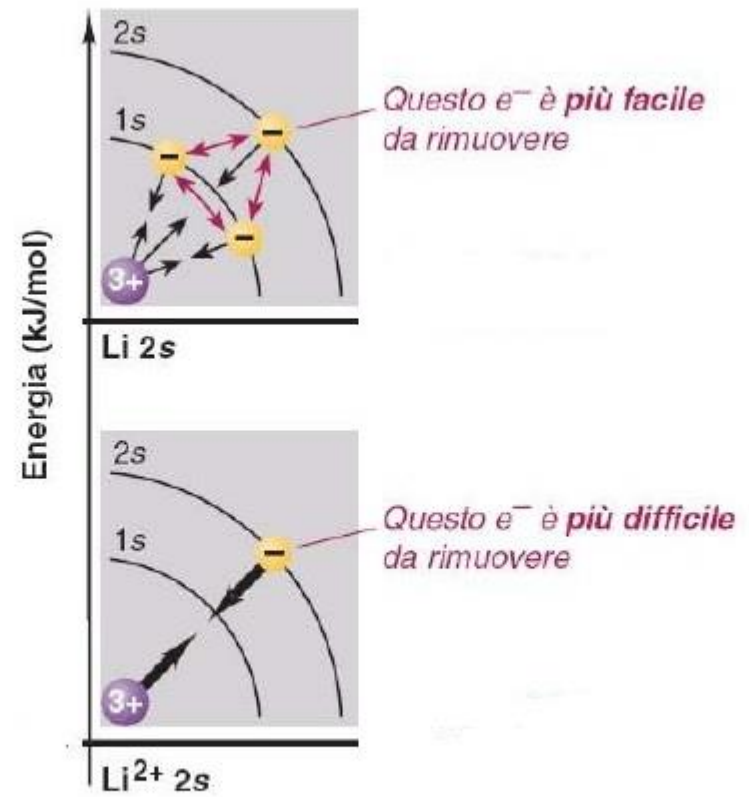
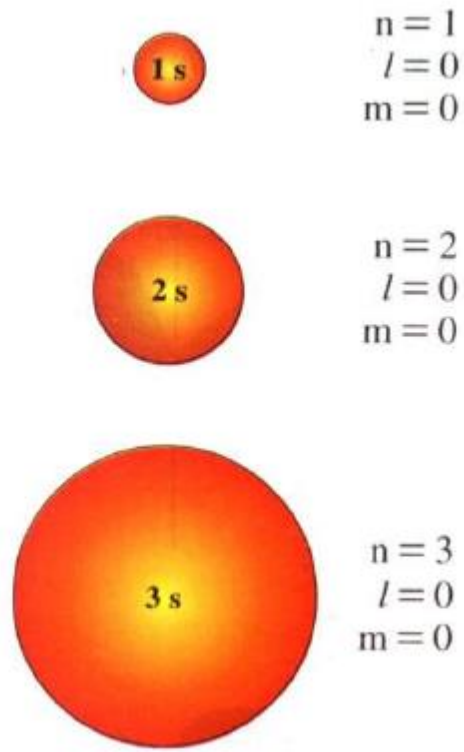
In assenza di campi elettrici e magnetici esterni  $n$  ed  $l$  determinano essenzialmente il valore energetico

Atomi diversi  $\rightarrow$  nuclei diversi  $\rightarrow$  energia diversa di orbitali con nome uguale

- $l = 0$  orbitali s
- $l = 1$  orbitali p
- $l = 2$  orbitali d
- $l = 3$  orbitali f



$3d \rightarrow 4s$

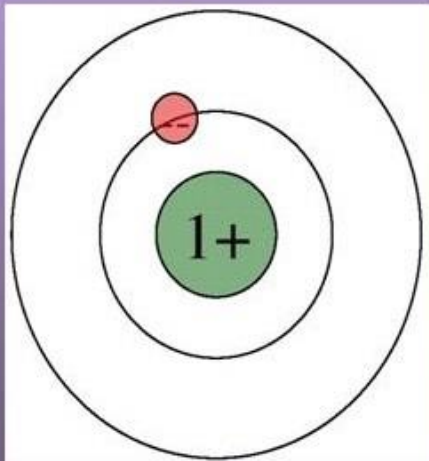


Effetto di schermo degli elettroni

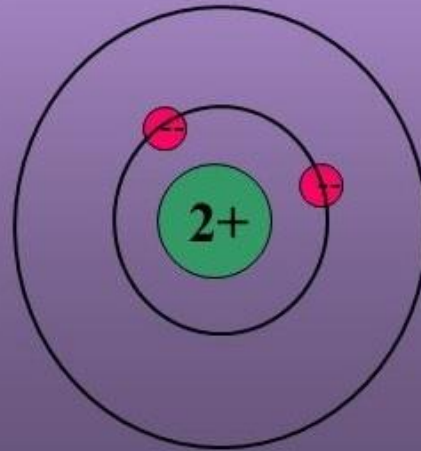
- Carica nucleare Efficace (Effettiva )  $Z_{\text{eff}}$

In un atomo polielettronico gli elettroni **più interni** esplicano una azione di **“schermo”** per cui un elettrone risente di una carica  $Z_{\text{eff}}$  (**carica nucleare efficace**) minore di  $Z$

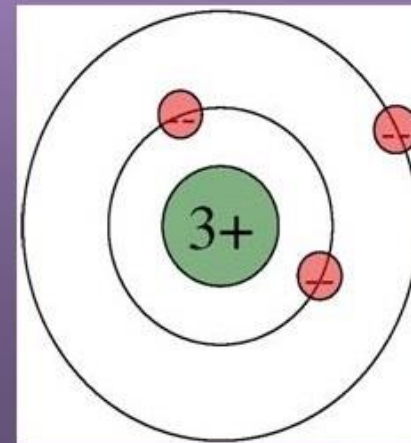
H



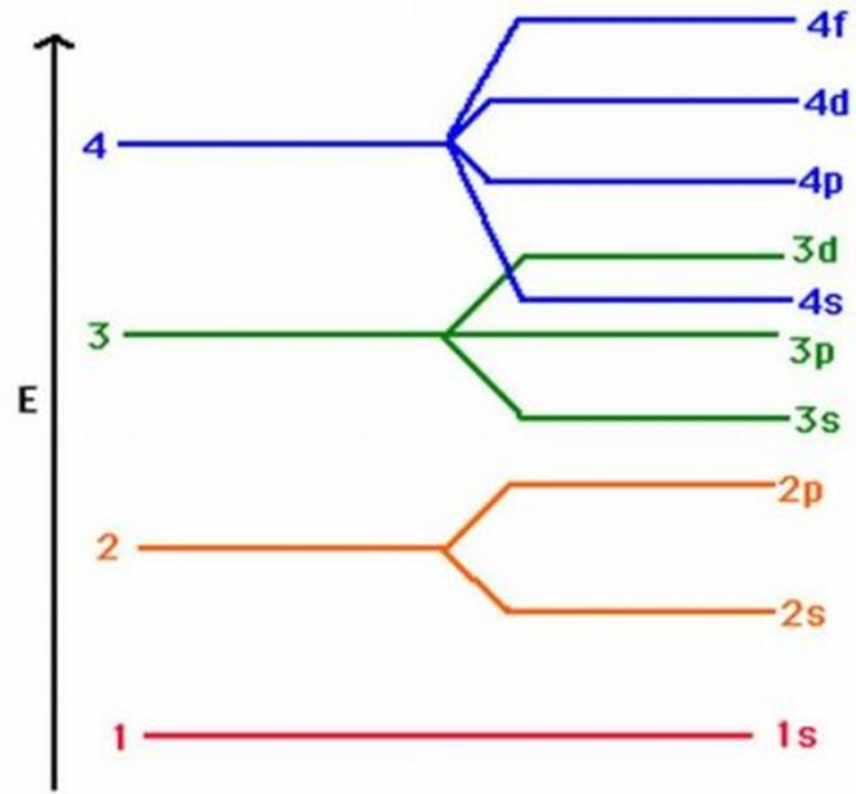
He



Li



- Effetto di schermo degli elettroni

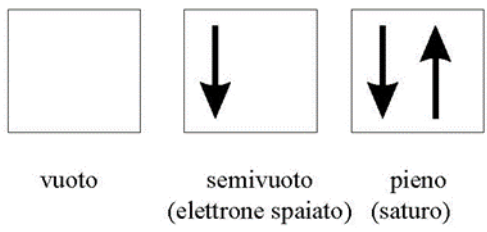
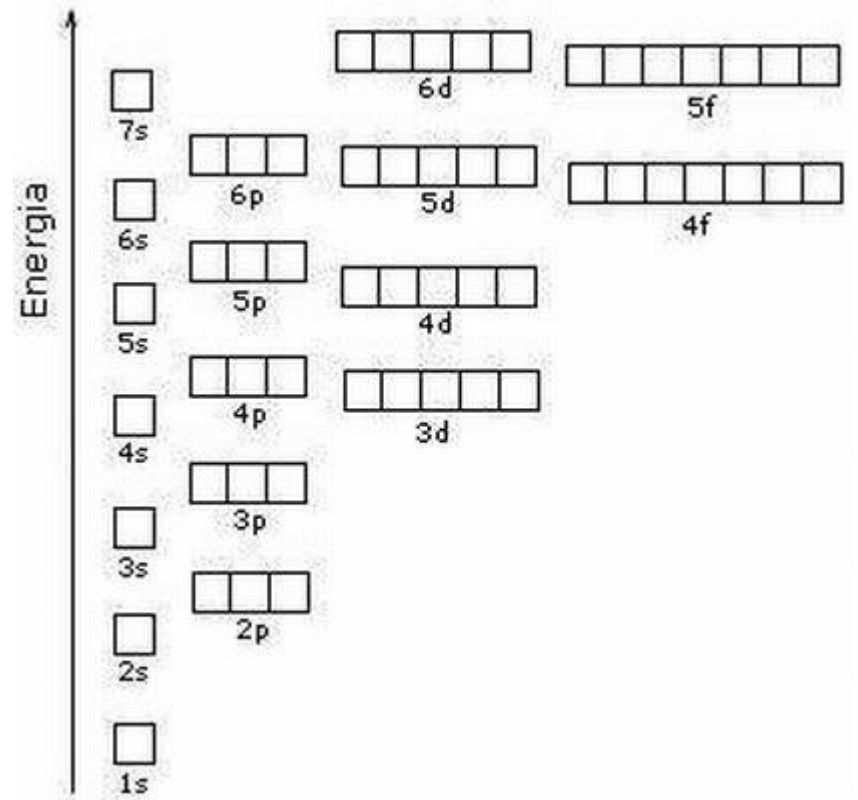
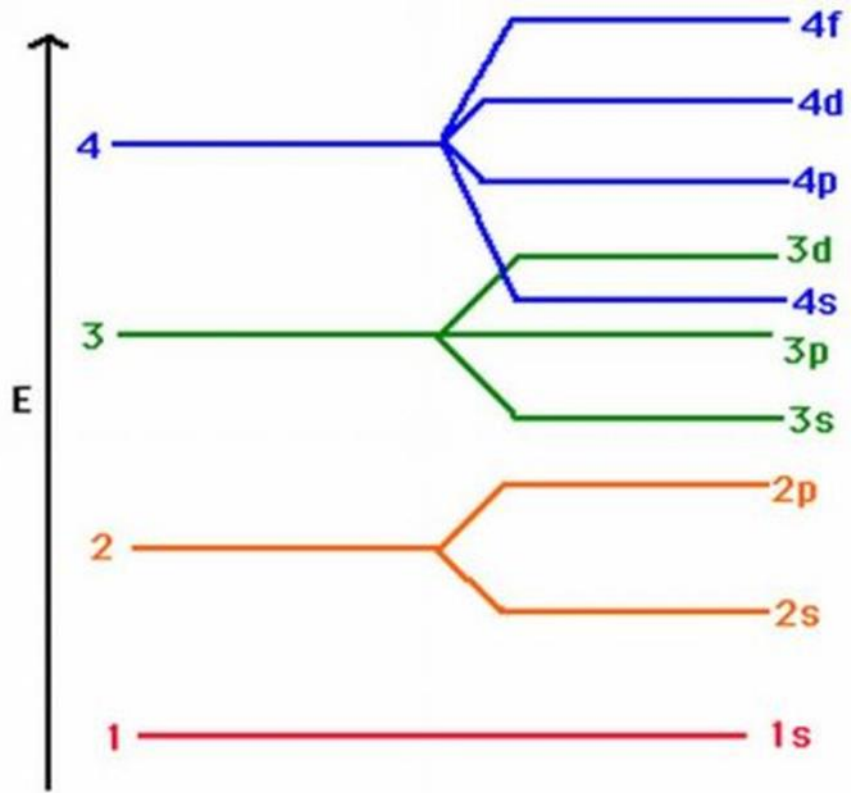


$l = 0$  orbitali s                      sempre a simmetria sferica (1 orbitale)

$l = 1$  orbitali p       $n \geq 2 \rightarrow l = 1 \rightarrow m = -1; m = 0; m = 1$  (3 orbitali)  
 ▪ isoenergetici (degeneri)

$l = 2$  orbitali d       $n \geq 3 \rightarrow l = 2 \rightarrow m = -2; m = -1; m = 0; m = 1; m = 2$  (5 orbitali)  
 ▪ isoenergetici (degeneri)

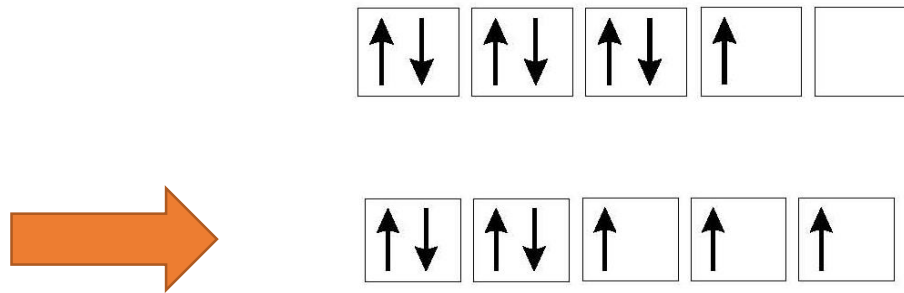
$l = 3$  orbitali f (7 orbitali)



- gli elettroni aggiunti vanno ad occupare i livelli a più bassa energia (principio della minima energia)

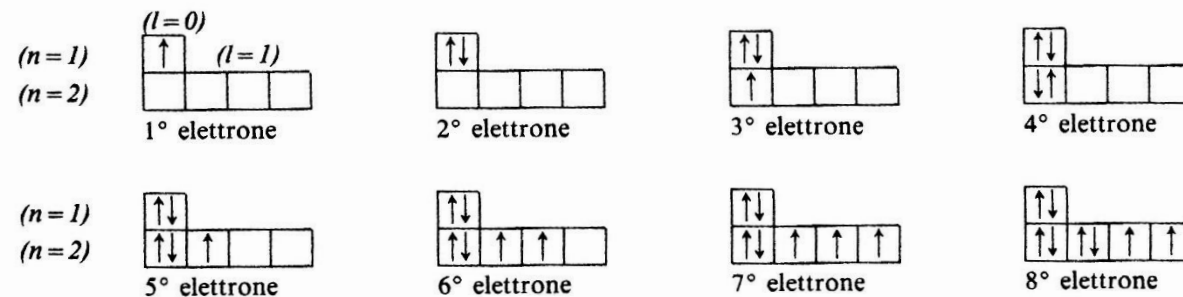
- Principio della massima molteplicità (Hund)

Se più elettroni occupano orbitali degeneri, si disporranno, con spin paralleli, sul massimo numero possibile di questi orbitali (rappresentazione convenzionale)



- Principio di Pauli → max. due elettroni con spin antiparalleli su ogni orbitale

esempio: Aufbau Ossigeno (8 protoni)



$n = 1$      *H*  
 ( $z = 1$ )  
 1s

<i>He</i> ( $z = 2$ ) 1s <sup>2</sup>
---

$n = 2$	<i>Li</i> ( $z = 3$ ) 1s <sup>2</sup> 2s	<i>Be</i> ( $z = 4$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	<i>B</i> ( $z = 5$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p	<i>C</i> ( $z = 6$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	<i>N</i> ( $z = 7$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	<i>O</i> ( $z = 8$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	<i>F</i> ( $z = 9$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	<i>Ne</i> ( $z = 10$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>
---------	---	--	--	---	---	---	---	---

$n = 3$	<i>Na</i> ( $z = 11$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s	<i>Mg</i> ( $z = 12$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup>	<i>Al</i> ( $z = 13$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p	<i>Si</i> ( $z = 14$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	<i>P</i> ( $z = 15$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	<i>S</i> ( $z = 16$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	<i>Cl</i> ( $z = 17$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	<i>Ar</i> ( $z = 18$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>
---------	---	--	---	--	---	---	--	--

$n = 4$	<i>K</i> ( $z = 19$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> 4s	<i>Ca</i> ( $z = 20$ ) 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>
---------	---	---