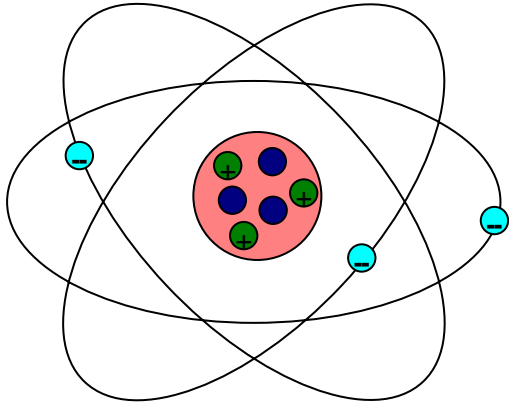


# Struttura elettronica degli atomi

## Modello atomico di Rutherford



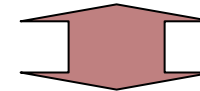
**Incompatibilità con le leggi classiche dell'elettromagnetismo:**  
**una carica elettrica in moto non rettilineo ed uniforme perde progressivamente la propria energia**

### **Insufficienze della fisica classica:**

- 1. Lo spettro del corpo nero**
- 2. L'effetto fotoelettrico**
- 3. Spettri atomici e molecolari**

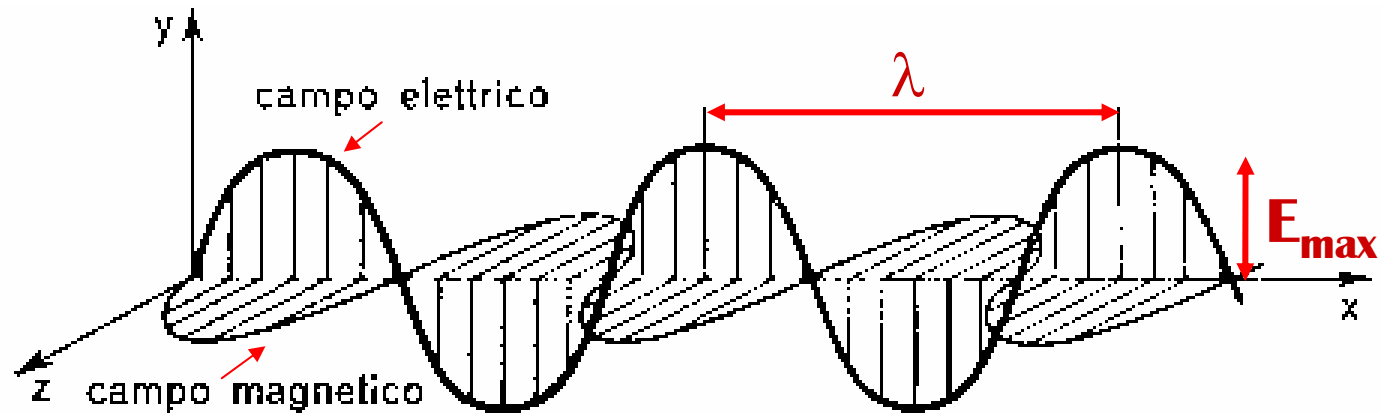
### **PROBLEMA**

**Sistemi macroscopici**



**Sistemi microscopici**

# Generalità sulle onde elettromagnetiche



**Ampiezza massima:**  $E_{\max}$  ( $B_{\max}$ )

**Numero d'onda:**  $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$  ( $\text{m}^{-1}$ )

**Lunghezza d'onda:**  $\lambda$  (m)

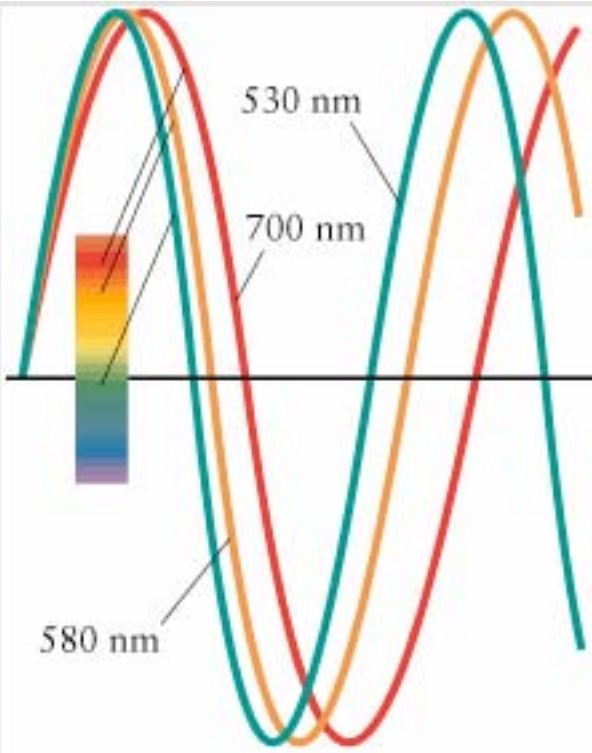
$$\lambda = c\tau = \frac{c}{\nu}$$

**Periodo:**  $\tau$  (s)

**Frequenza:**  $\nu = \frac{1}{\tau}$  ( $\text{s}^{-1}$ )

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

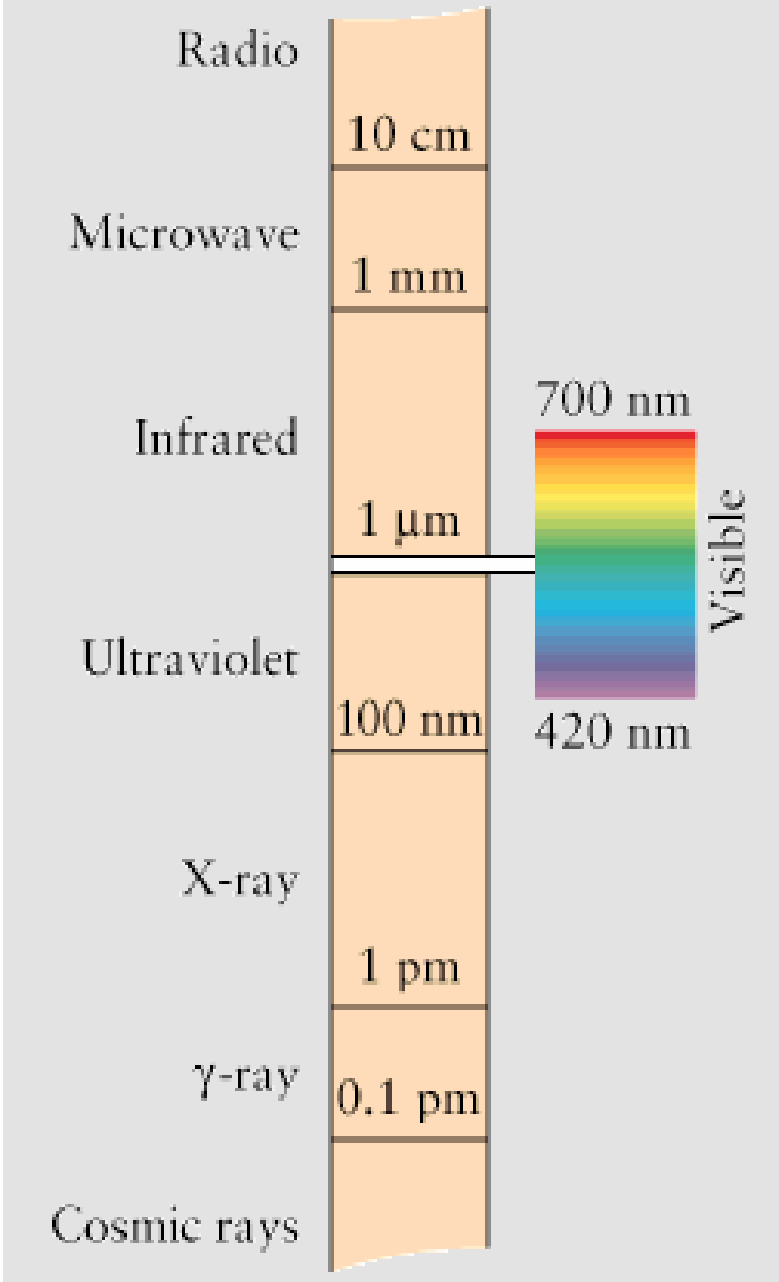
# Generalità sulle onde elettromagnetiche



**Ultravioletto**

**Infrarosso**

—  $\lambda$  →  
 ←  $\nu$  —  
 ← **E** —



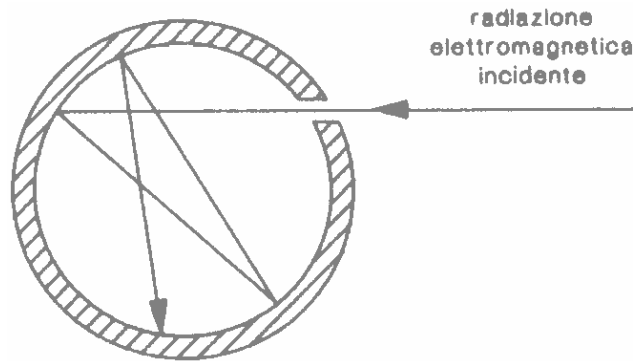
unità di energia molto usata è eV  
 =  $1.602 \cdot 10^{-19}$  Joule

Struttura elettronica della materia

## ***Lo spettro del corpo nero***

**Ogni corpo solido emette radiazioni a spettro continuo. L'intensità della radiazione emessa dipende da  $T$  e l'andamento di  $I$  in funzione di  $\lambda$  dipende dalla natura della sostanza considerata.**

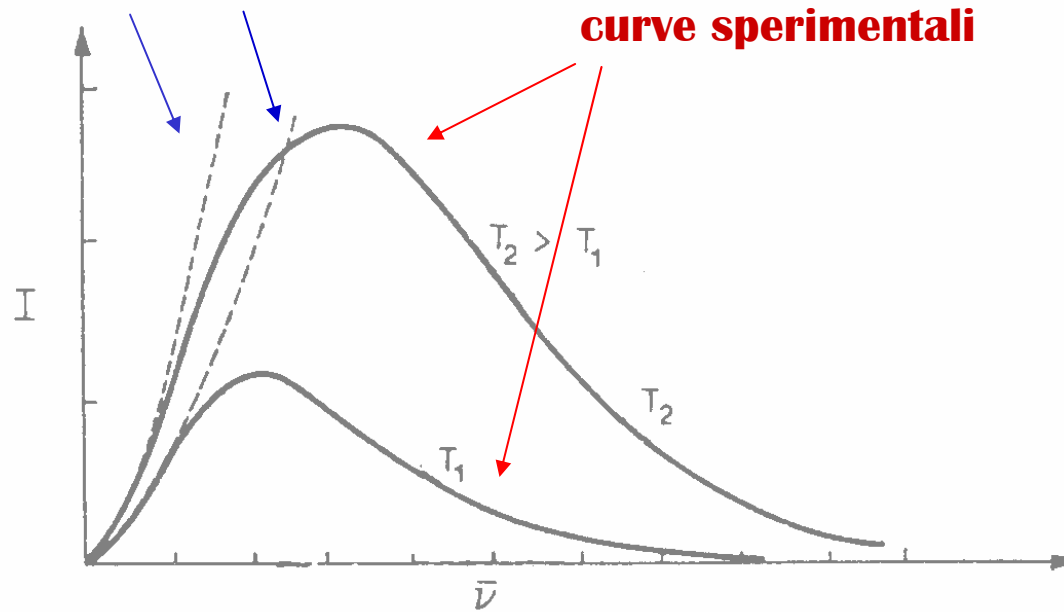
**Se il corpo emittente è un corpo nero, cioè un corpo che assorbe completamente la radiazione incidente (cavità a pareti opache con un piccolo foro), lo spettro emesso risulta indipendente dalla natura della sostanza.**



**Cavità assimilabile a un corpo nero**

# Lo spettro del corpo nero

emissione secondo le leggi classiche



Secondo le leggi classiche dell'elettromagnetismo l'emissione è dovuta agli oscillatori elettronici elementari che oscillano con tutte le frequenze emettendo una radiazione corrispondente, di intensità:

$$I = \frac{2\pi\kappa T}{c^2} \nu^2 \quad \kappa = \text{costante di Boltzmann}$$

**➡ Incongruenza con i dati sperimentali**

Struttura elettronica della materia

## ***Lo spettro del corpo nero***

**Planck (1899):** se si considera che i singoli oscillatori elementari possano emettere energia di qualsiasi valore, non si evita la discordanza fra teoria e dati sperimentali.

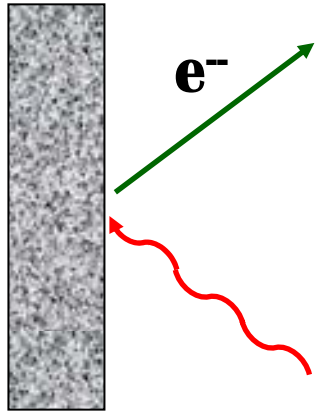
Si supera, invece, il problema, ammettendo che ogni oscillatore possa assorbire o emettere solo quantità di energia che sia un multiplo intero di una quantità minima, detta **quanto**  $\varepsilon$ .

$$\varepsilon = h \nu$$

**$h = 6.625 \cdot 10^{-34}$  J s** costante di Planck

Nasce la **teoria dei quanti**.

# Effetto fotoelettrico



**Emissione di elettroni solo per  $\nu > \nu_0$**

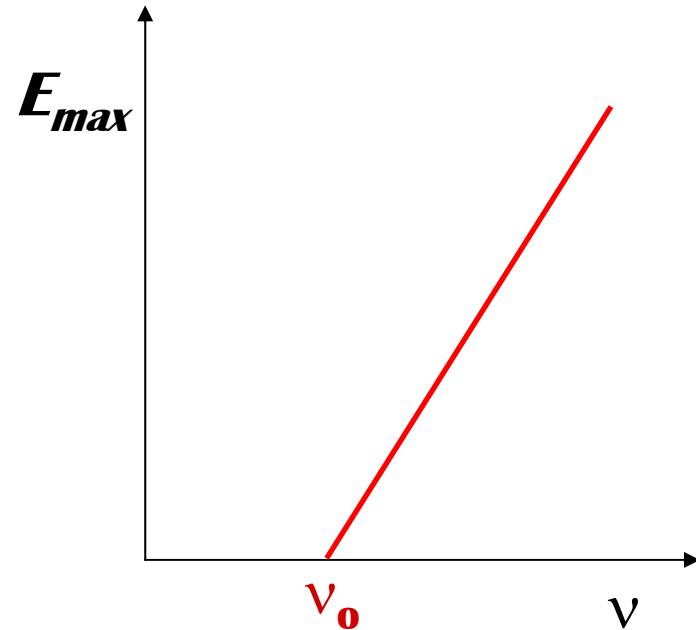
$$\frac{1}{2}mv_{max}^2 = E_{max} = h(\nu - \nu_0)$$

$$I_{e^-} = \frac{\text{num. } e^-}{s \cdot m^2} \propto I_{\text{radiazione}}$$

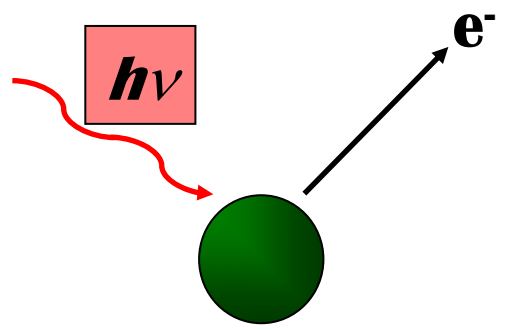
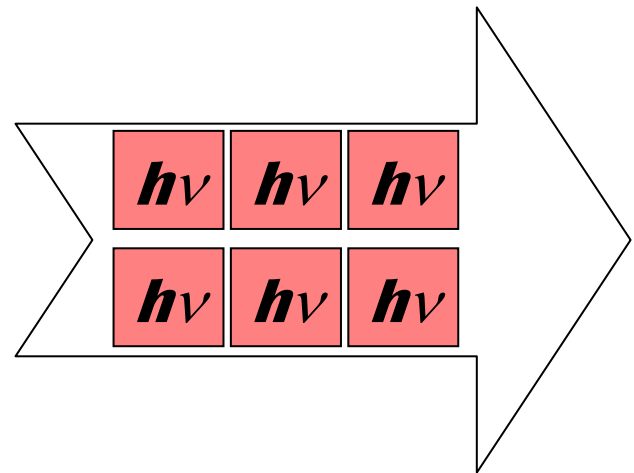
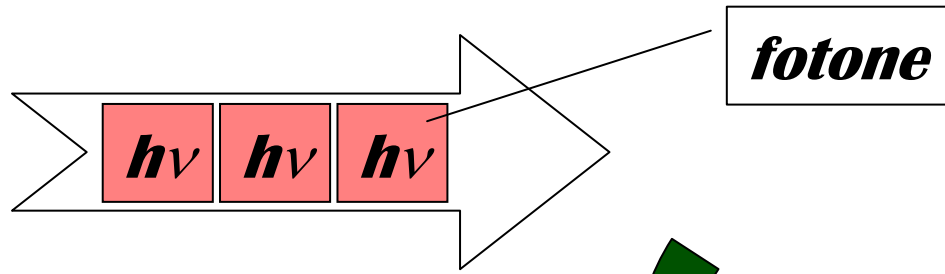
**La velocità e, quindi, l'energia degli  $e^-$  emessi è indipendente da  $I_{\text{radiazione}}$**



**In contrasto con  
la fisica classica**

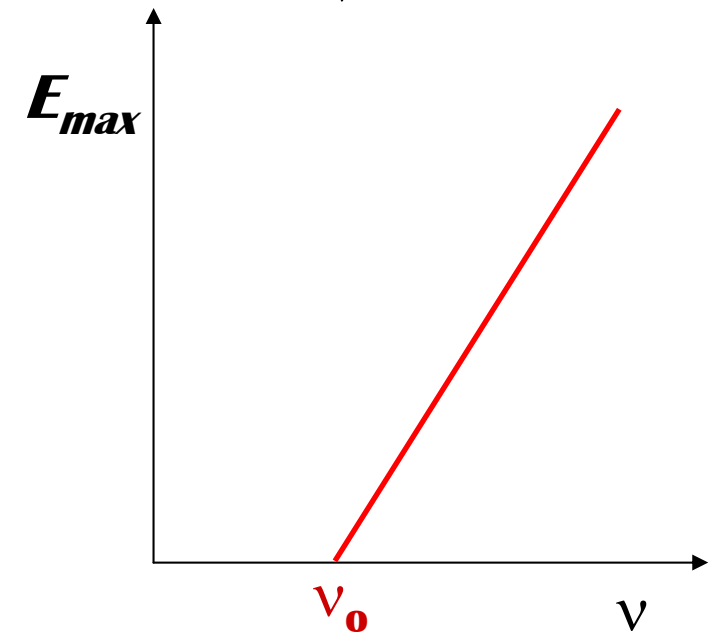


# Effetto fotoelettrico - Einstein (Premio Nobel 1921)



$$E = h\nu > E_0$$

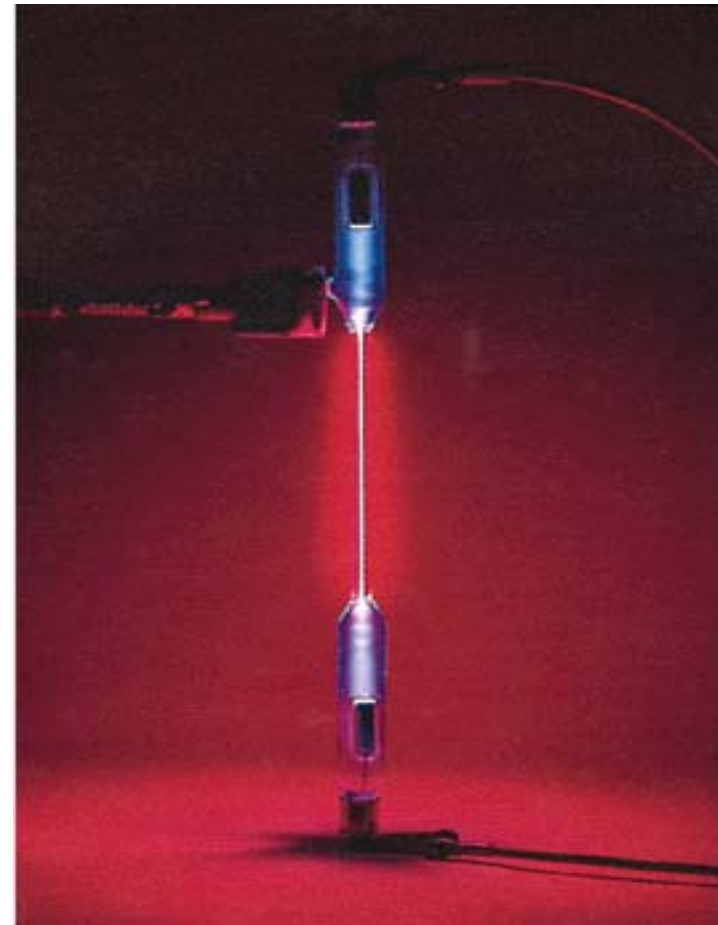
$$E_{\text{cin}} = E - E_0 = h(\nu - \nu_0)$$



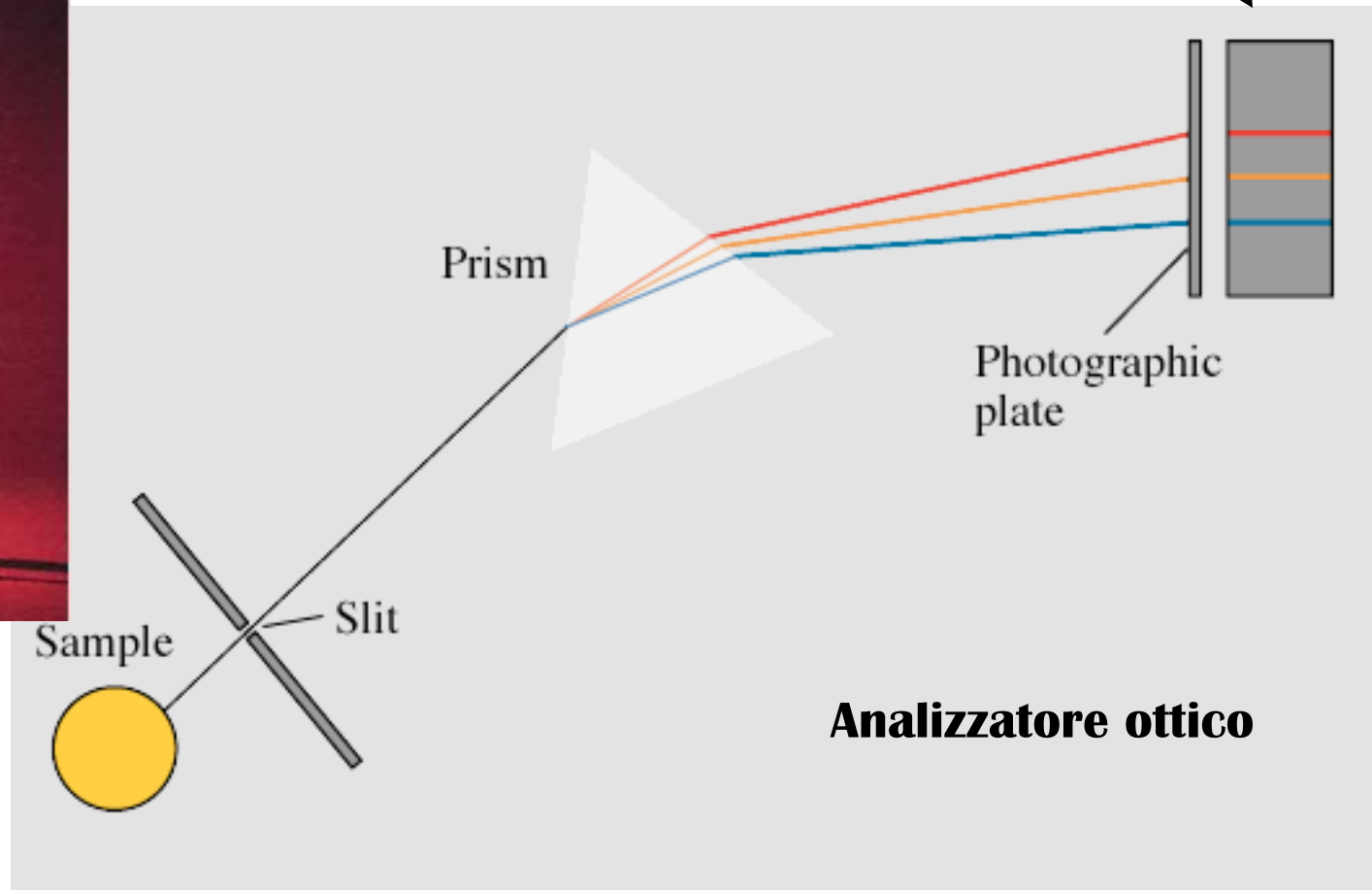
Struttura elettronica della materia



# ***Spettro di emissione dell'atomo di idrogeno***

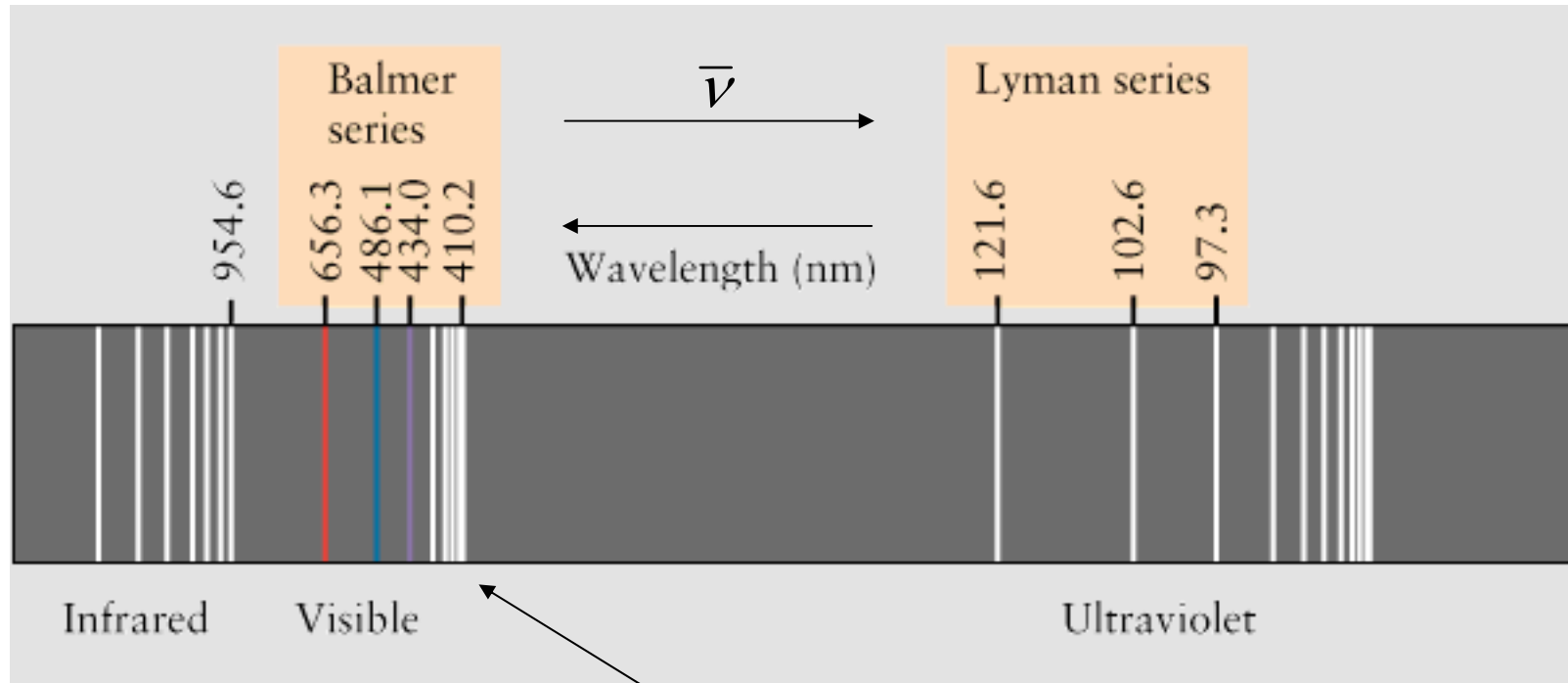


**Spettro *a righe***



**Analizzatore ottico**

# Spettro di emissione dell'atomo di idrogeno



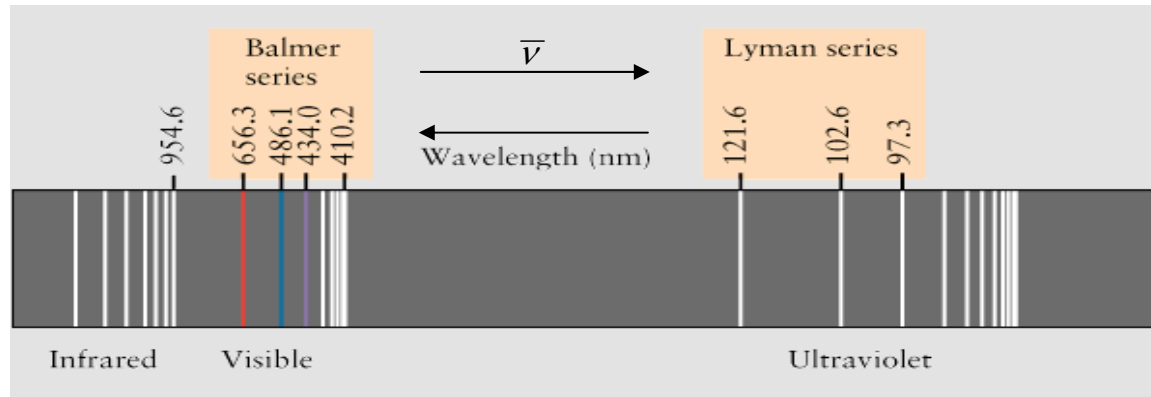
## Serie di Balmer

$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n = \infty$$

$$R_H = 109677.76 \text{ cm}^{-1}$$

# Spettro di emissione dell'atomo di idrogeno



$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

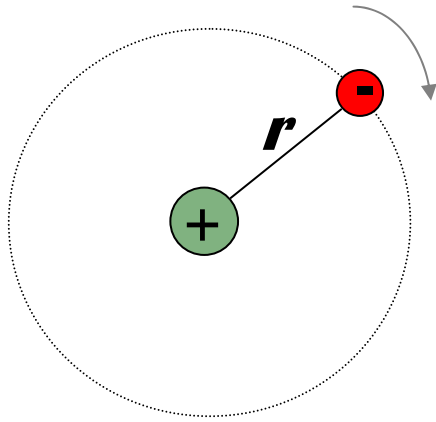
$$m = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$n = m + 1, \dots, \infty$$

<b><i>Serie</i></b>	<b><i>m</i></b>	<b><i>n</i></b>
<b>Lyman</b>	<b>1</b>	<b>2, 3, 4, ...</b>
<b>Balmer</b>	<b>2</b>	<b>3, 4, 5, ...</b>
<b>Paschen</b>	<b>3</b>	<b>4, 5, 6, ...</b>
<b>Brackett</b>	<b>4</b>	<b>5, 6, 7, ...</b>
<b>Pfund</b>	<b>5</b>	<b>6, 7, 8, ...</b>

Valida anche per **ioni idrogenoidi** ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ ,  $\text{Be}^{+++}$ , ...)

# Il modello atomico di Bohr (Nobel 1922)



$$\vec{F} = m\vec{a}$$

**Legge di Coulomb**

$$|\vec{F}| = \frac{e^2}{r^2}$$

**(sistema c.g.s.)**

$$|\vec{a}| = \frac{v^2}{r}$$

**Accelerazione centripeta**

$$\frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

$$r = \frac{e^2}{mv^2}$$

**No limitazioni su  $r$  e  $E$**

$$E = E_{cin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r}$$

$$E = \frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r}$$

# ***Il modello atomico di Bohr: primo postulato***

## ***Primo postulato***

### ***Postulato della quantizzazione della quantità di moto***

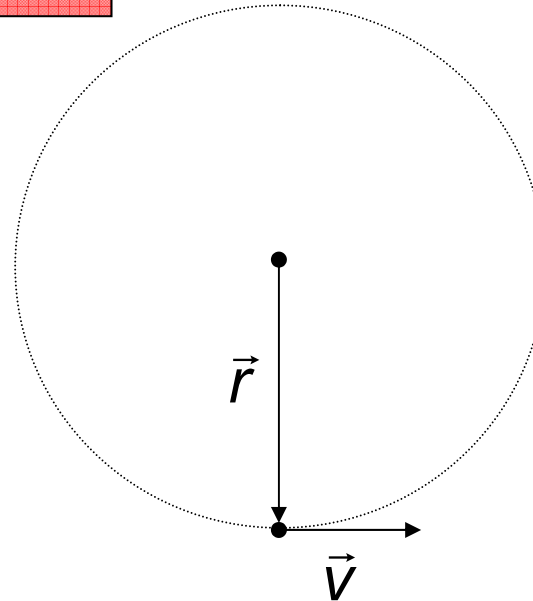
***“il valore del modulo del momento della quantità di moto dell’elettrone che ruota intorno al nucleo deve essere un multiplo intero di  $h/2\pi$ ”***

$$r \cdot m \cdot v = n \frac{h}{2\pi}$$

$$n = 1, 2, \dots, \infty$$

$$\vec{p} = \vec{r} \wedge m\vec{v}$$

$$|\vec{p}| = r \cdot m \cdot v \cdot \text{sen } \alpha$$



$$\alpha = 90^\circ \quad \text{sen } \alpha = 1$$

$$|\vec{p}| = r \cdot m \cdot v$$

# ***Il modello atomico di Bohr: primo postulato***

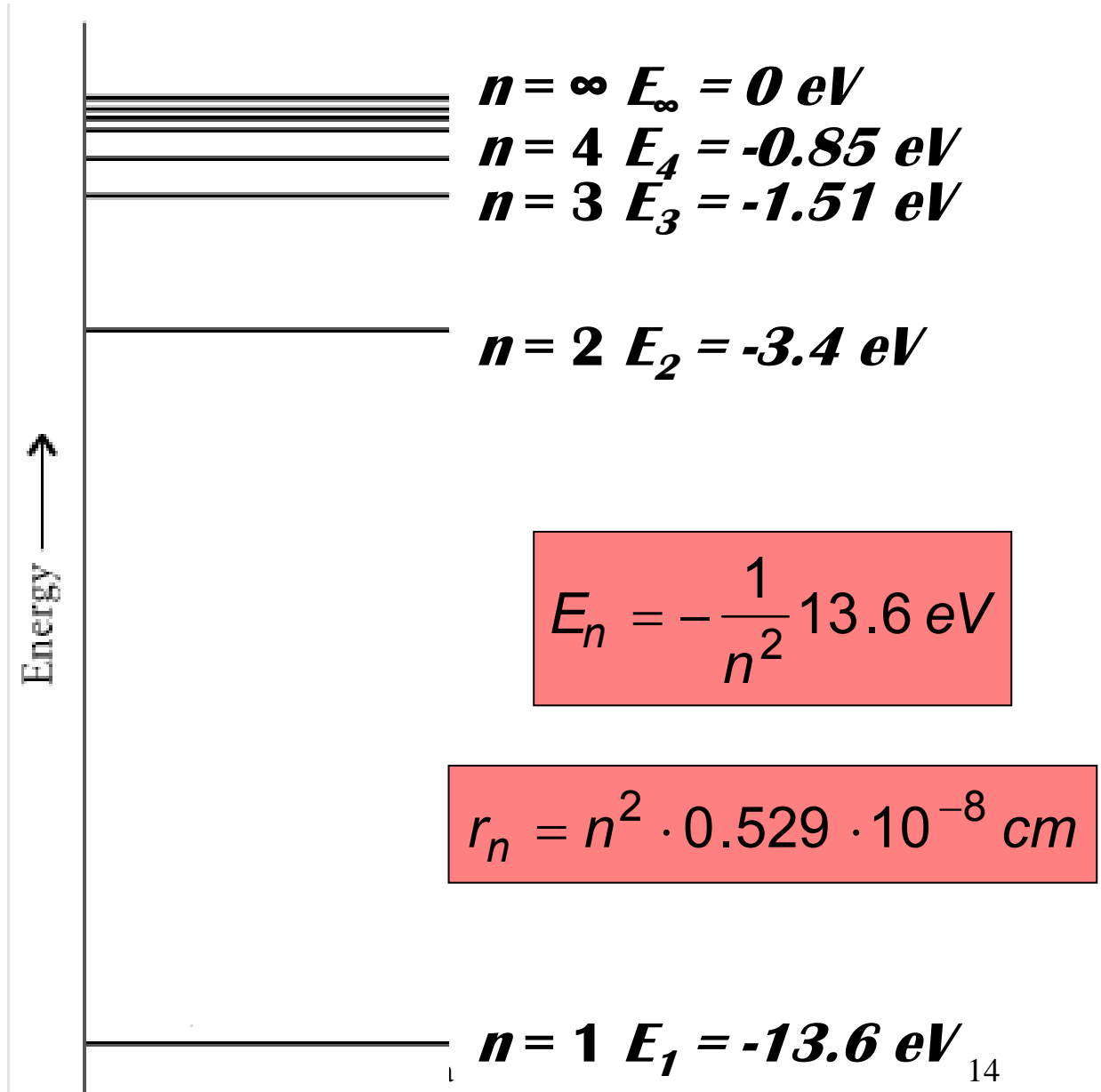
$$r \cdot m \cdot v = n \frac{h}{2\pi}$$

$$r = \frac{e^2}{mv^2}$$

$$E = -\frac{e^2}{2r}$$

$$r_n = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$



# Il modello atomico di Bohr: primo postulato

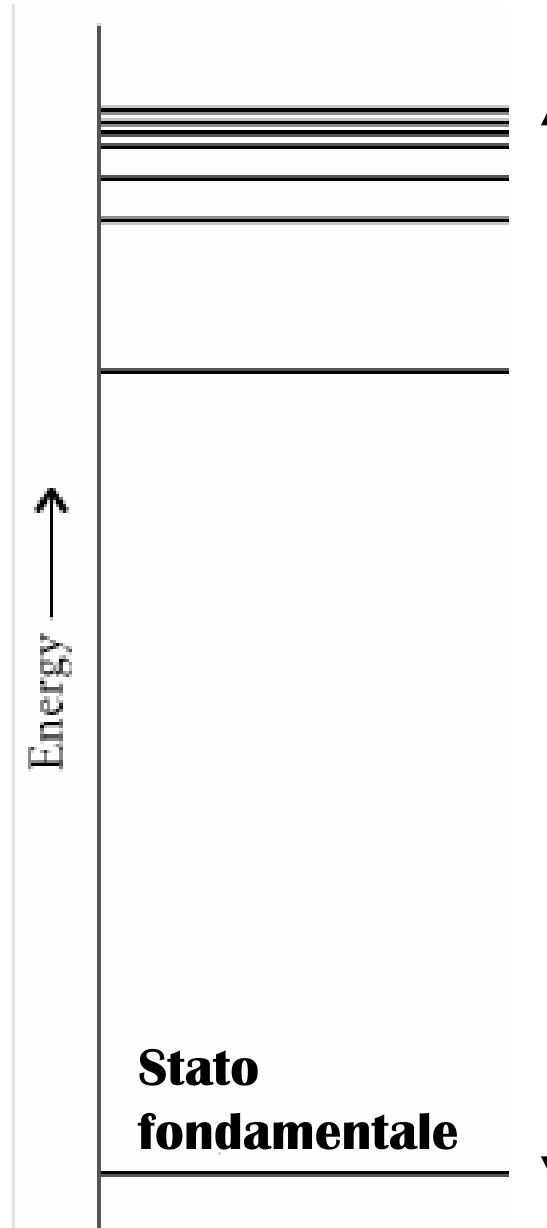
$n = \text{cost}$

$r = \text{cost}$

$E = \text{cost}$

No emissione  
radiazioni e.m.

Stati stazionari  
Stati quantici



$$\Delta E = E_{\infty} - E_1 = 13.6 \text{ eV}$$

Energia di ionizzazione

$$E_n = -\frac{1}{n^2} 13.6 \text{ eV}$$

$$r_n = n^2 \cdot 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

$$r_1 = a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

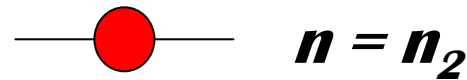
Primo raggio di Bohr

# Il modello atomico di Bohr: secondo postulato

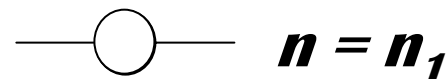
## Secondo postulato

***“l’atomo assorbe o emette energia sotto forma di radiazione elettromagnetica solo quando si verificano dei passaggi dell’elettrone da uno stato quantico ad un altro: l’energia, corrispondente alla differenza tra i livelli energetici dei due stati, viene assorbita o emessa sotto forma di un unico quanto”***

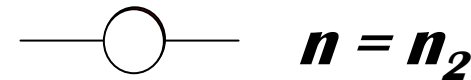
### Assorbimento



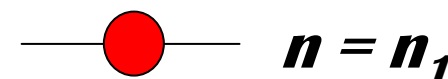
$$E = |E_2 - E_1|$$
$$\nu = \frac{|E_2 - E_1|}{h}$$



### Emissione

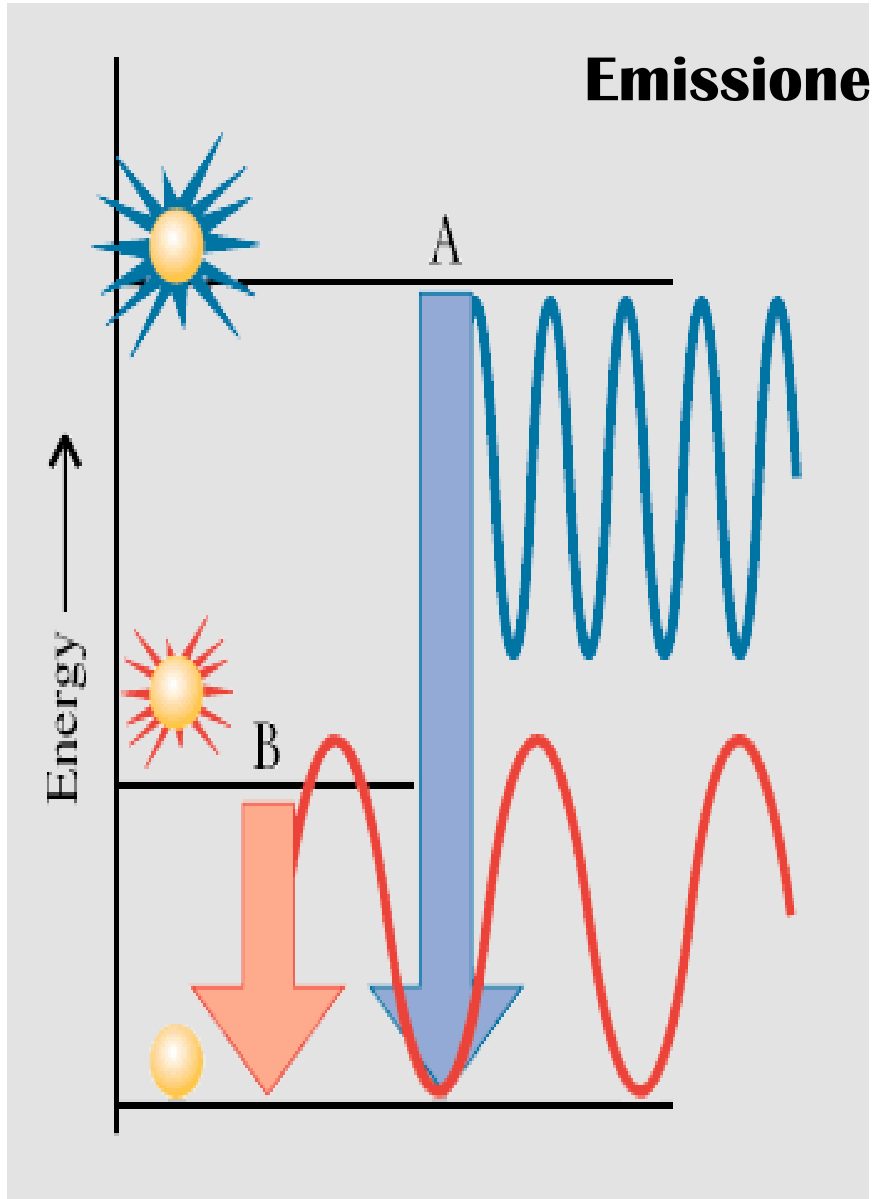


$$E = |E_1 - E_2|$$
$$\nu = \frac{|E_1 - E_2|}{h}$$



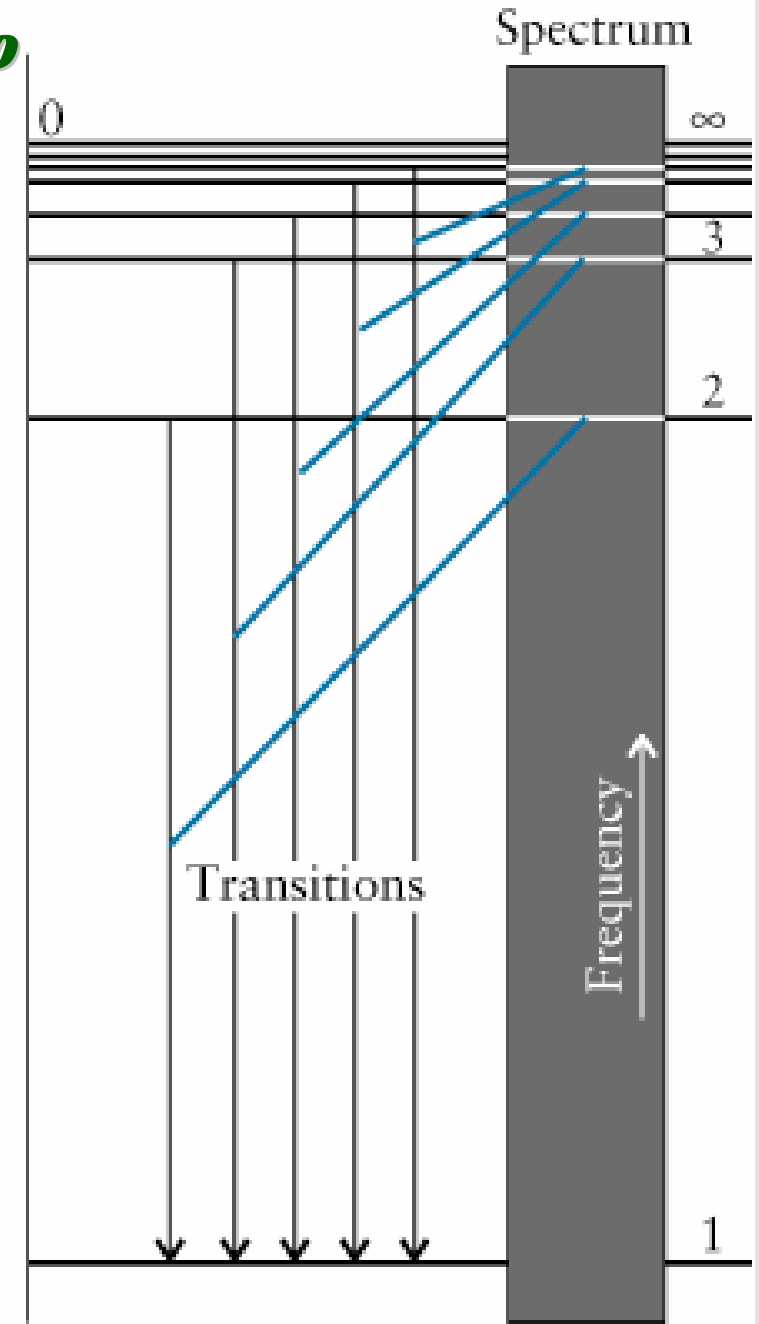


# *Il modello atomico di Bohr: secondo postulato*



$$E_A > E_B$$
$$\nu_A > \nu_B$$
$$\lambda_A < \lambda_B$$

Energy ↑



Struttura elettronica della materia

## ***Il modello atomico di Bohr***

$$h\nu = |E_{n'} - E_{n''}|$$

$$\nu = \frac{|E_{n'} - E_{n''}|}{h}$$

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{|E_{n'} - E_{n''}|}{hc}$$

**Legge di Bohr**

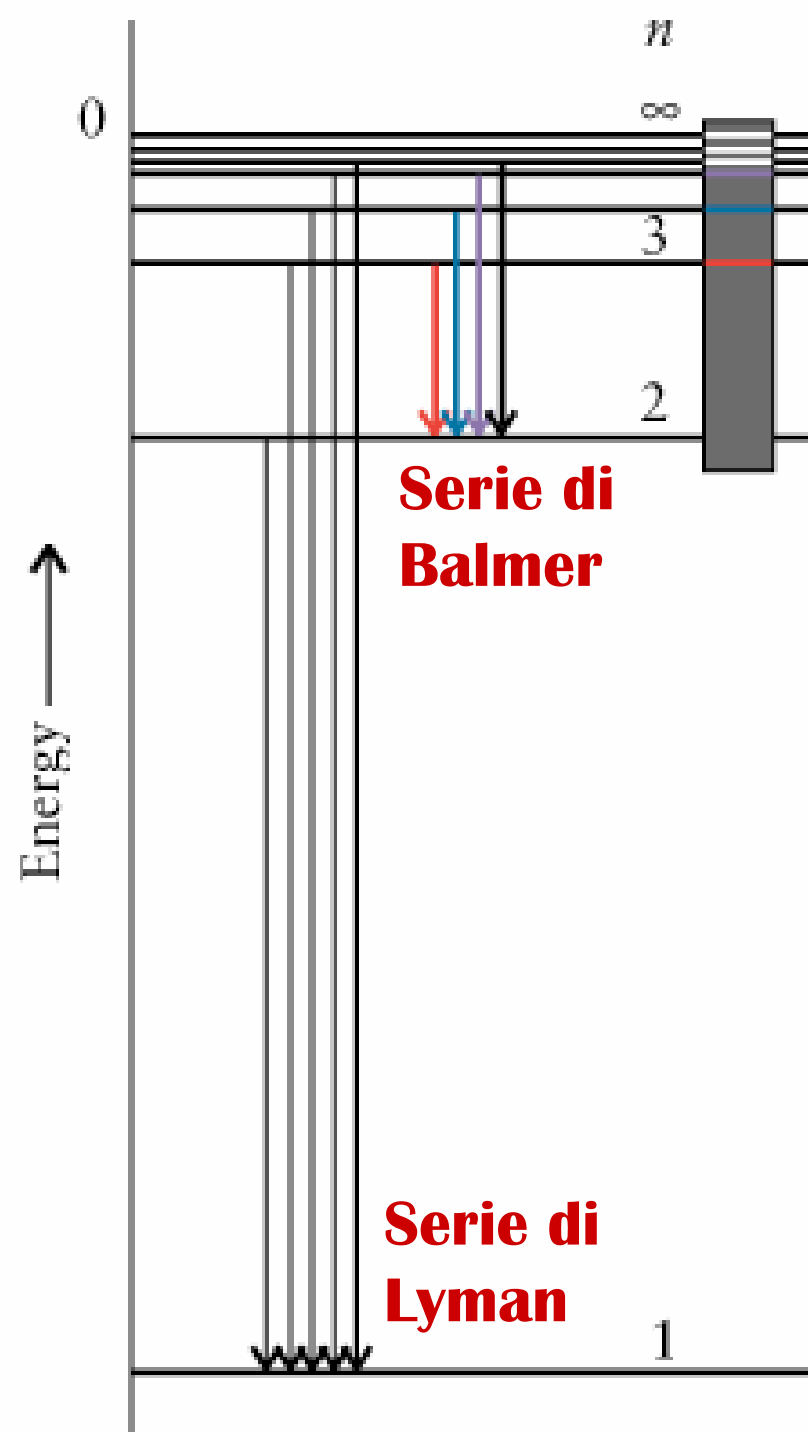
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$

$$\bar{\nu} = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3 c} \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n''^2} \right)$$

$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R_H = 109677.76 \text{ cm}^{-1}$$

***Il modello atomico di Bohr:  
spettri atomici  
di emissione***



## ***Critica al modello atomico di Bohr***

**Introduzione di postulati senza giustificazione**

**Molte divergenze fra risultati teorici e quelli sperimentali**

**Ha senso parlare di ORBITE di elettroni intorno al nucleo ?**

**Moto nel piano x-y di un punto materiale sottoposto ad una forza F**

$$F_x = m \cdot a_x = m \cdot \frac{d^2x}{dt^2}$$

$$F_y = m \cdot a_y = m \cdot \frac{d^2y}{dt^2}$$

**Da una doppia integrazione si ottiene:  $x = x(t)$**

$$y = y(t)$$

$$\Rightarrow y = f(x) \quad \text{traiettoria}$$

**La doppia integrazione richiede la conoscenza di  $x_0, v_{x0}, y_0, v_{y0}$ .**

**È necessario conoscere **posizione** e **velocità** del punto materiale in dato istante.**

# ***Principio di indeterminazione di Heisenberg (Nobel 1932)***

**È impossibile determinare con **precisione** contemporaneamente la **posizione** e la **velocità** di una **particella di massa molto piccola****

**Osservazione di un e<sup>-</sup>:**

**Incertezza nella determinazione della posizione:**  $\Delta x \cong \frac{\lambda}{\text{sen}\theta}$

**Incertezza nella determinazione della velocità:**  $\Delta(mv_x) \cong \frac{2h \text{sen}\theta}{\lambda}$

$\lambda$  = **lunghezza d'onda radiazione usata per illuminare l'e<sup>-</sup>**

$\theta$  = **semiapertura angolare della lente usata per l'osservazione**

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \cong h / m$$

$$\Delta y \cdot \Delta v_y \cong h / m$$

$$\Delta z \cdot \Delta v_z \cong h / m$$

**relazioni di indeterminazione di Heisenberg**

# **Principio di indeterminazione di Heisenberg (Nobel 1932)**

**Sfera di massa  $m = 10^{-5} \text{ g}$**

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \cong \frac{h}{m} = \frac{6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}}{10^{-5} \text{ g}} = 6.6 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\Delta x = 10^{-10} \text{ cm} \quad \Delta v_x = 6.6 \cdot 10^{-12} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

**incertezza trascurabile**

**Elettrone  $m = 10^{-27} \text{ g}$**

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \cong \frac{h}{m} = \frac{6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}}{10^{-27} \text{ g}} = 6.6 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\Delta x = 10^{-10} \text{ cm} \quad \Delta v_x = 6.6 \cdot 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$$

**$v_x$  indeterminata**

## ***Dualismo onda-particella***

Si possono osservare **analogie di comportamento** fra **fotoni** ed **elettroni**:

◆ i fenomeni di **riflessione e di rifrazione** per gli  $e^-$  sono descrivibili con le leggi classiche della meccanica del punto, per i raggi luminosi con l'ottica geometrica.

Es: Propagazione in un mezzo a indice di rifrazione costante  
Propagazione in uno spazio con campo elettrico nullo

◆ i fenomeni di **diffrazione e di interferenza** per i raggi luminosi sono descritti attraverso l'ottica ondulatoria, **per gli  $e^-$  fu necessario introdurre una nuova meccanica**

**Onde di De Broglie**

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

$\lambda_{\text{De Broglie}} \rightarrow 0$     fisica macroscopica  $\rightarrow$  meccanica classica

$\lambda_{\text{De Broglie}} \rightarrow 10^{-8} \text{cm}$     fisica atomica  $\rightarrow$  meccanica ondulatoria

# ***La meccanica ondulatoria - L'equazione di Schrödinger***

**Equazione che descrive la propagazione di un'onda:**

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \quad f = f(x, y, z, t)$$

**Per esempio per un'onda elettromagnetica,  $f : \vec{E}, \vec{B}$**

**Equazione dell'onda di De Broglie associata ad una particella:**

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}} \quad \psi = \psi(x, y, z, t)$$

**$\psi$  è detta funzione d'onda**



# La meccanica ondulatoria - L'equazione di Schrödinger

$|\psi|^2 \propto$  **probabilità di trovare la particella in un dato punto dello spazio in certo istante**

Descrizione **PROBABILISTICA** del moto degli elettroni

$$\int_{V=\infty} |\psi|^2 dV = 1$$
$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad E = E_{cin} + E_{pot} = E_{pot} + \frac{1}{2}mv^2 \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - E_{pot})}} = \frac{v}{v}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{2m}{h^2 v^2} (E - E_{pot}) \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

## ***L'atomo di idrogeno nella meccanica ondulatoria***

**Per onde di De Broglie monocromatiche, esprimendo  $\psi$  come funzione sinusoidale del tempo, si ottiene:**

**Equazione di Schrödinger valida per gli **stati stazionari****

**(indipendenti dal tempo)**

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_{pot}) \psi = 0$$

**Atomo di idrogeno  $E_{pot} = -e^2/r$**

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

**La funzione  $\psi$  deve:**

- **essere nulla all'infinito**
- **essere continua e ad un solo valore in ogni punto dello spazio, insieme alle sue derivate**
- **soddisfare la condizione di normalizzazione**
- **soddisfare la condizione di ortogonalità**

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

$$\int_{V=\infty} \psi_m \psi_n dV = 0$$

## ***Risoluzione dell'eq. di Schrödinger per l'atomo di idrogeno***

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi m}{h^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad \text{Integrando:}$$

**Soluzioni accettabili solo per determinati valori dell'energia E (autovalori):**

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

**Numero quantico principale**

→ **coincide con l'espressione dedotta da Bohr!**

**Quantizzazione dell'energia (livelli energetici discreti):**

- **non da postulati arbitrariamente imposti (Bohr)**
- **conseguenza logica della natura dell'equazione e delle condizioni che la funzione d'onda  $\psi$  deve soddisfare per avere un significato fisico valido**

## ***Numeri quantici***

Le funzioni d'onda  $\psi$  soluzioni dell'equazione di Schrödinger (**autofunzioni**) sono funzioni matematiche complicate delle coordinate dello spazio, contengono tre **numeri quantici** e sono completamente definite dai loro valori

- Numero quantico principale ***n*** : ***definisce l'energia dell'e***

- Numero quantico secondario o azimutale ***l*** : ***definisce il***

***momento della quantità di moto***

$$|\vec{p}| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \frac{h}{2\pi}$$

- Numero quantico magnetico ***m<sub>l</sub>*** : ***definisce la proiezione del momento della quantità di moto sulla direzione z di un campo magnetico esterno***

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, 0, +(l-1), +l$$

$$p_z = m_l \cdot \frac{h}{2\pi}$$

## ***Numeri quantici e orbitali***

Ogni **autofunzione** associata ad una definita terna di valori di **numeri quantici**  $n, l, m_l$  ( $\psi_{n, l, m_l}$ ) viene chiamata **ORBITALE**.

Ogni orbitale corrisponde ad un determinato **stato quantico** possibile dell'elettrone, la cui energia è:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$

### **Tipi di orbitali**

<b><math>l = 0</math></b>	<b>Orbitale s</b>
<b><math>l = 1</math></b>	<b>Orbitale p</b>
<b><math>l = 2</math></b>	<b>Orbitale d</b>
<b><math>l = 3</math></b>	<b>Orbitale f</b>

# ***Numeri quantici e orbitali***

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$m_l = -l, -(l - 1), \dots, 0, +(l - 1), +l$$

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0$$

**1 orbitale 1s**

$$n = 2 \quad l = 0 \quad m_l = 0$$

**1 orbitale 2s**

$$l = 1 \quad m_l = 0, \pm 1$$

**3 orbitali 2p**

$$n = 3 \quad l = 0 \quad m_l = 0$$

**1 orbitale 3s**

$$l = 1 \quad m_l = 0, \pm 1$$

**3 orbitali 3p**

$$l = 2 \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

**5 orbitali 3d**

$$n = 4 \quad l = 0 \quad m_l = 0$$

**1 orbitale 4s**

$$l = 1 \quad m_l = 0, \pm 1$$

**3 orbitali 4p**

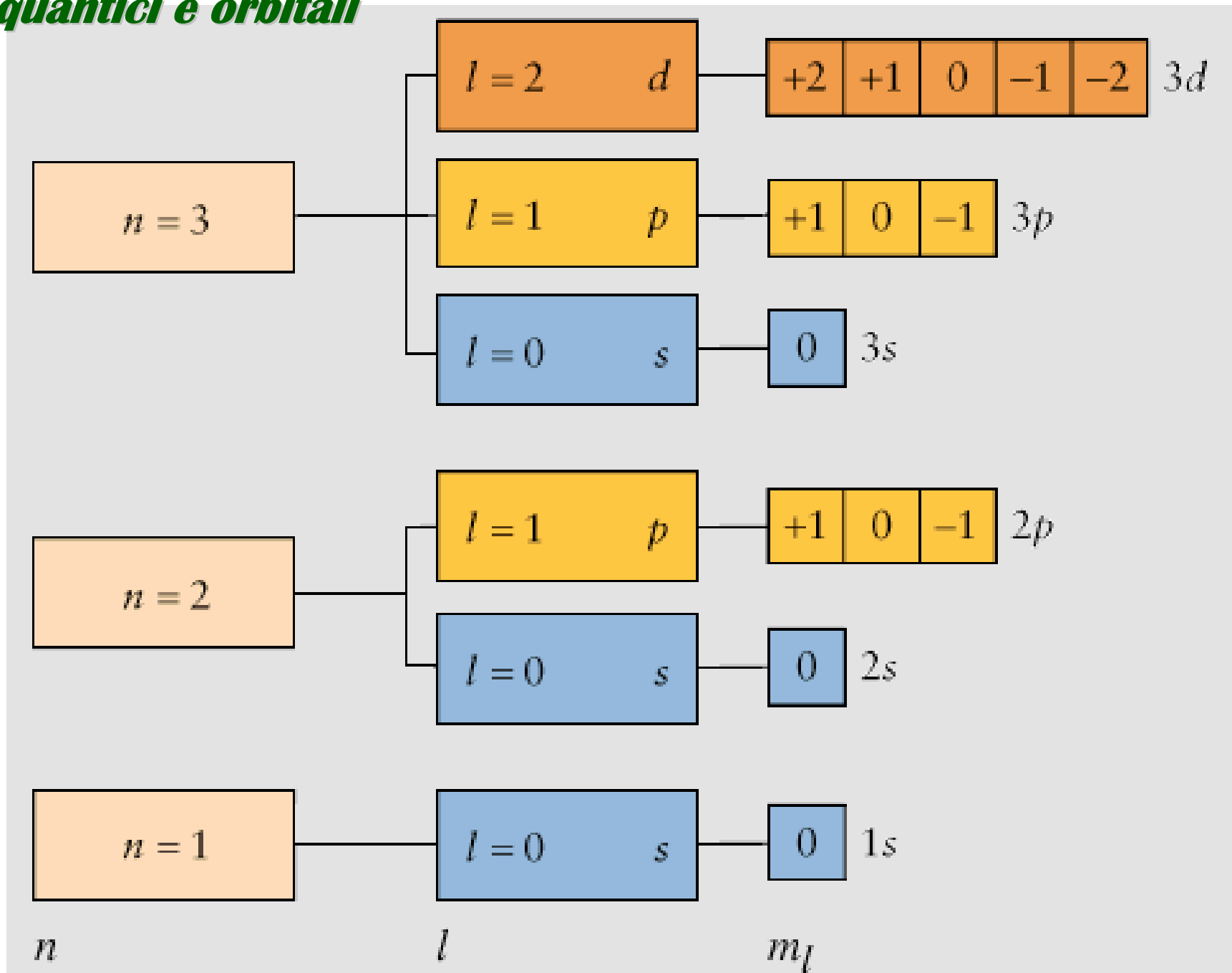
$$l = 2 \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

**5 orbitali 4d**

$$l = 3 \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$$

**7 orbitali 4f**

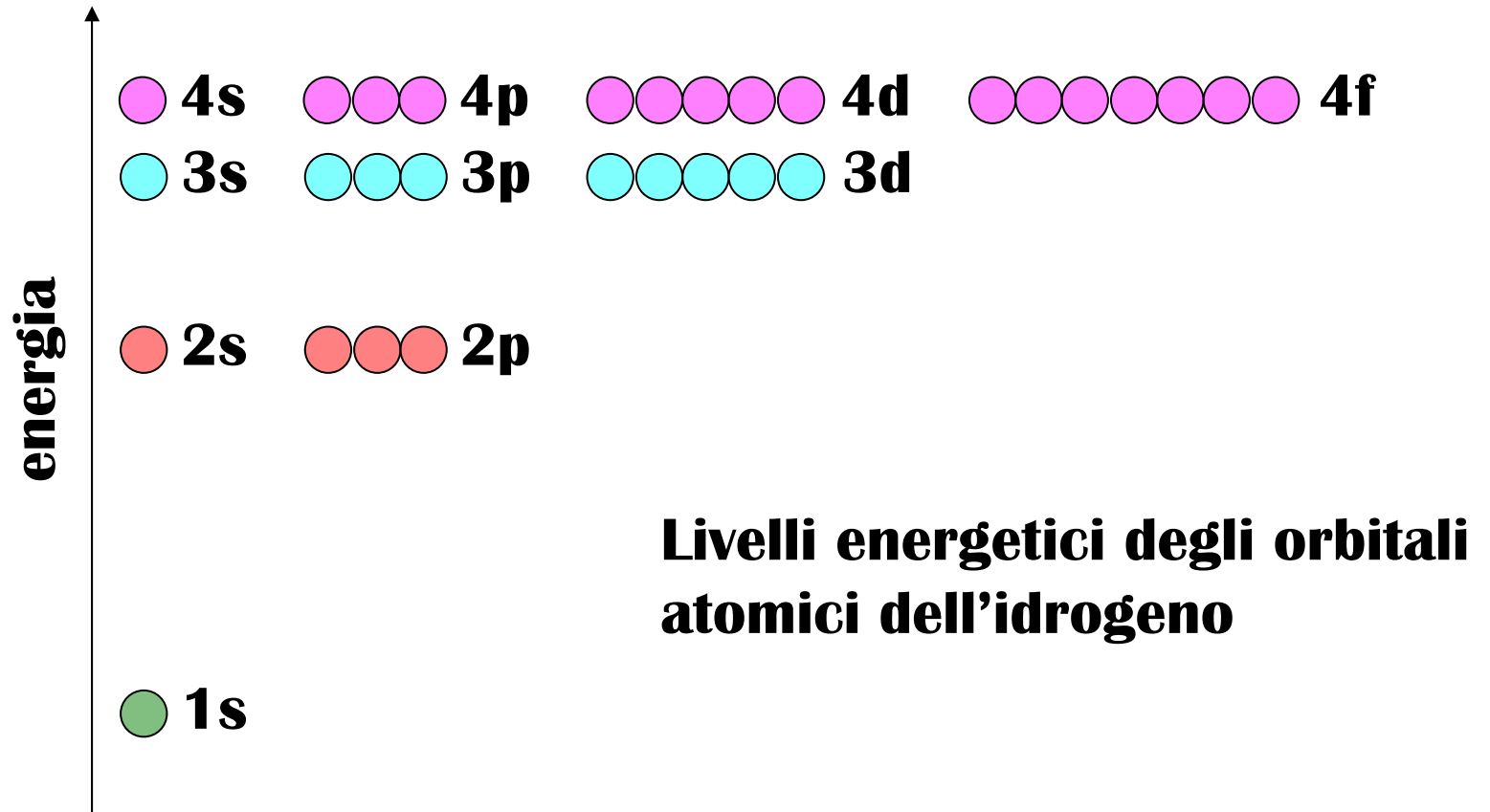
# ***Numeri quantici e orbitali***



# *Livelli energetici degli orbitali atomici dell'idrogeno*

Per l'atomo di idrogeno il valore dell'energia di un dato orbitale dipende **soltanto** dal numero quantico principale  $n$ .

Orbitali caratterizzati dallo stesso livello energetico (2s-2p, 3s-3p-3d, ecc.) sono detti **DEGENERI**.

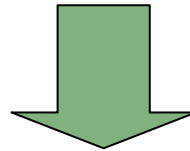




# *Rappresentazione degli orbitali atomici*

## **ORBITA** (meccanica classica)

definita da un'equazione matematica che ne determina **completamente** il tipo e la rappresentazione geometrica nello spazio



## **ORBITALE** (meccanica quantistica)

definita da un'equazione matematica complicata

- la funzione d'onda  $\psi$  non ha un significato fisico diretto
- $|\psi|^2 \propto$  probabilità di trovare l'elettrone nel punto considerato

# Rappresentazione degli orbitali atomici

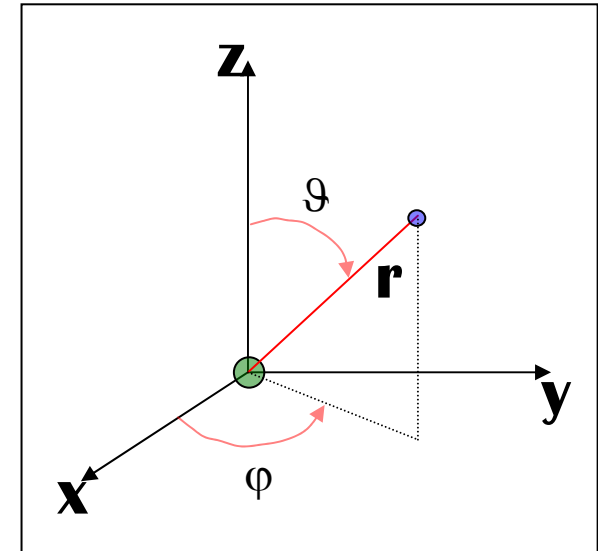
**Simmetria sferica dell'atomo:**



**coordinate cartesiane ortogonali (x,y,z)**



**coordinate polari sferiche (r,θ,φ)**



**Parte angolare: dipendenza dalla direzione**

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m_l}(\vartheta) \cdot \Phi_{m_l}(\varphi)$$

**Parte radiale: dipendenza dalla distanza dal nucleo**

# Espressioni delle funzioni d'onda per l'atomo di idrogeno

$n$	$l$	$m_l$	$R_{nl}(r)$	$\Theta_{lm}(\vartheta) \cdot \Phi_m(\varphi)$	Simbolo dell'orbitale
1	0	0	$2 \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	1s
2	0	0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	2s
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \vartheta$	2p <sub>z</sub>
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\begin{cases} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta \cos \varphi (*) \\ \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta \sin \varphi (*) \end{cases}$	2p <sub>x</sub> 2p <sub>y</sub>
3	0	0	$\frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	3s
3	1	0	$\frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \vartheta$	3p <sub>z</sub>
3	1	$\pm 1$	$\frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\begin{cases} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta \cos \varphi (*) \\ \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta \sin \varphi (*) \end{cases}$	3p <sub>x</sub> 3p <sub>y</sub>
3	2	0	$\frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{4} \left(\frac{5}{\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$	3d <sub>z<sup>2</sup></sub>
3	2	$\pm 1$	$\frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\begin{cases} \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi (*) \\ \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi (*) \end{cases}$	3d <sub>xz</sub> 3d <sub>yz</sub>
3	2	$\pm 2$	$\frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\begin{cases} \frac{1}{4} \left(\frac{15}{\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi (*) \\ \frac{1}{4} \left(\frac{15}{\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \vartheta \sin 2\varphi (*) \end{cases}$	3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 3d <sub>xy</sub>

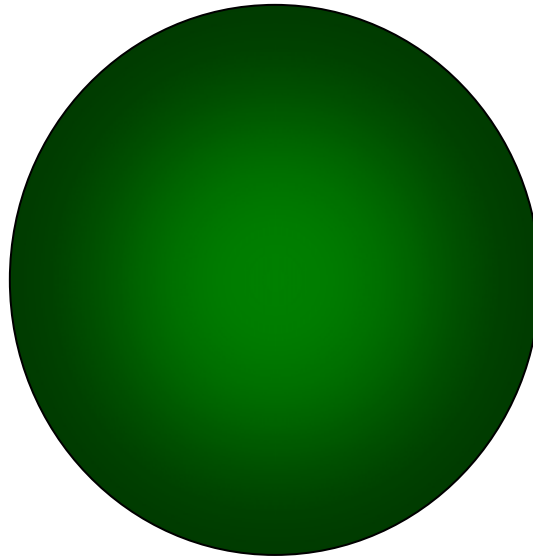
## Rappresentazione degli orbitali s dell'atomo di idrogeno

$$\psi (1s) = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi (2s) = \frac{1}{4(2\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$\psi$  dipende solo da r. Il fattore angolare  $\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$  è una costante

***Simmetria sferica***

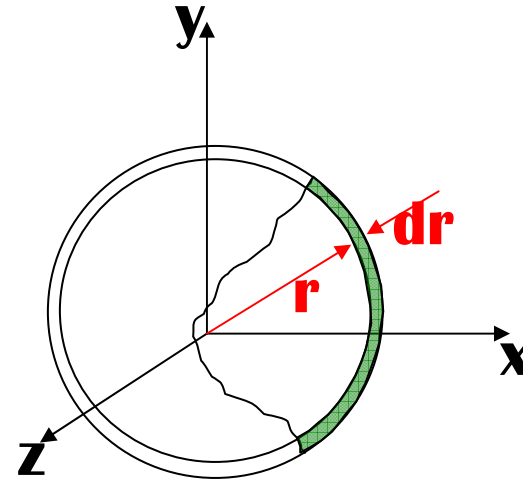


**Superficie di equiprobabilità:  $|\psi|^2 = \text{cost}$**

$$\int_V |\psi|^2 dV = 0.95$$

# Rappresentazione degli orbitali s dell'atomo di idrogeno

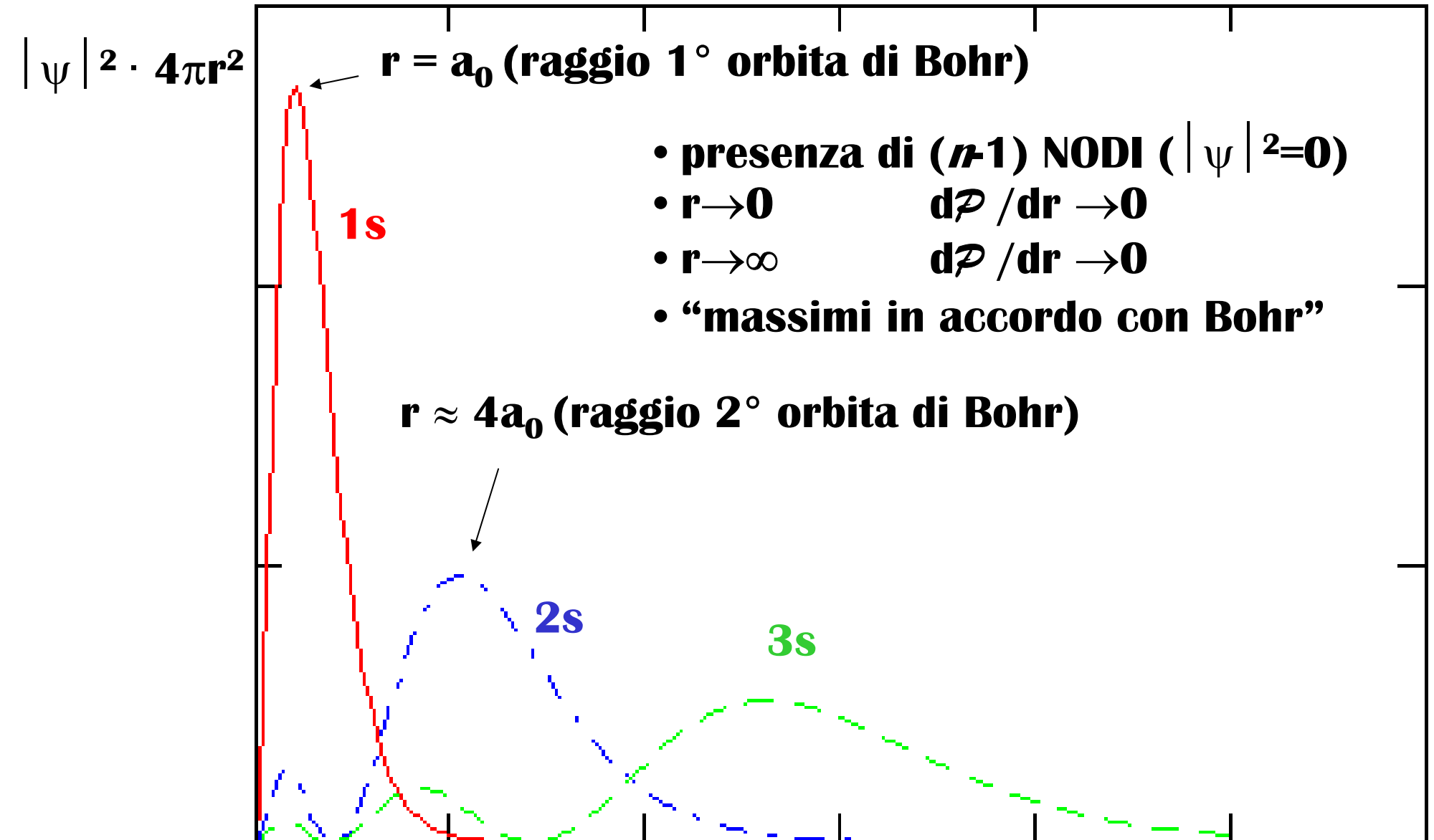
$|\psi|^2 \propto$  probabilità per unità di volume



$|\psi|^2 \cdot dV = |\psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = d\mathcal{P} \propto$  probabilità nel volume  
infinitesimo di guscio sferico compreso fra  $r$  e  $r+dr$

$d\mathcal{P} / dr =$  funzione di distribuzione della probabilità

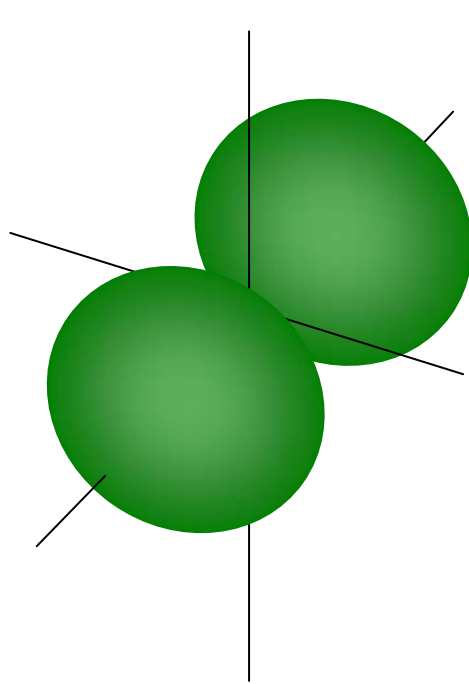
# Rappresentazione degli orbitali s dell'atomo di idrogeno



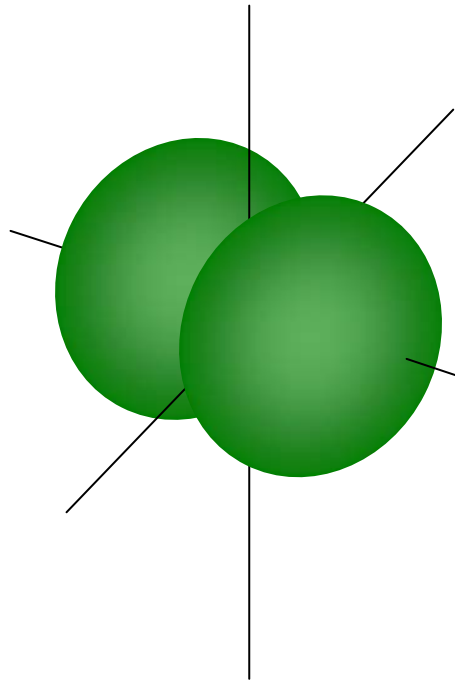
# ***Rappresentazione grafica degli orbitali p dell'atomo di idrogeno***

***Simmetria cilindrica***

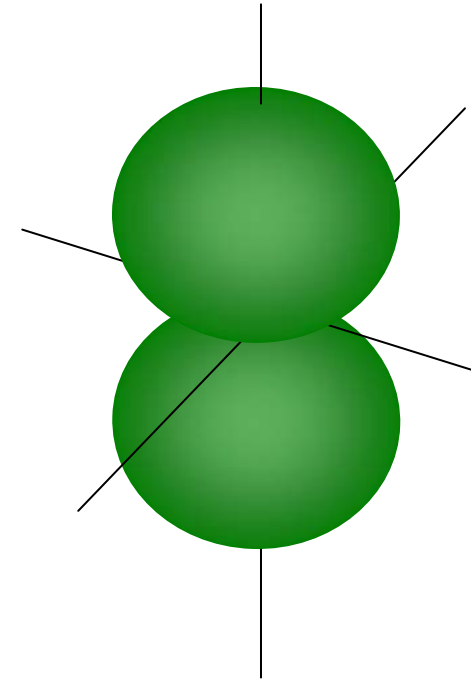
***Piano nodale  $\perp$  all'asse***



**2p<sub>x</sub>**



**2p<sub>y</sub>**



**2p<sub>z</sub>**

# *Rappresentazione grafica degli orbitali d dell'atomo di idrogeno*

