SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Equazione di Schrödinger

Nel 1926 E. Schrödinger propose un modello ondulatorio per la descrizione del comportamento di un elettrone nell'atomo di idrogeno.

Equazione di Schrödinger

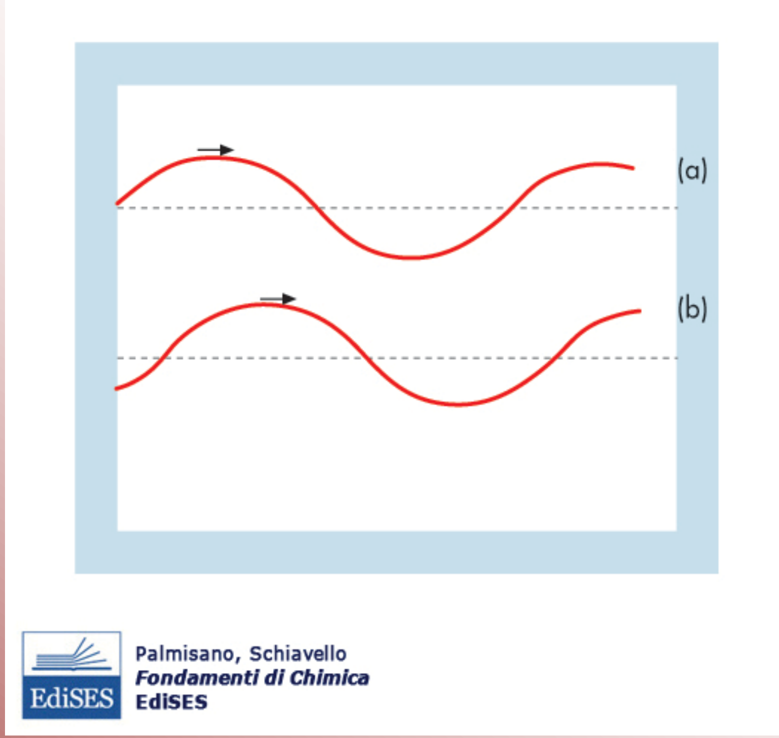
Nel 1926 E. Schrödinger propose un modello ondulatorio per la descrizione del comportamento di un elettrone nell'atomo di idrogeno.

Le onde si dividono in onde progressive e stazionarie a seconda che la loro ampiezza sia funzione dello spazio e del tempo o solo dello spazio.

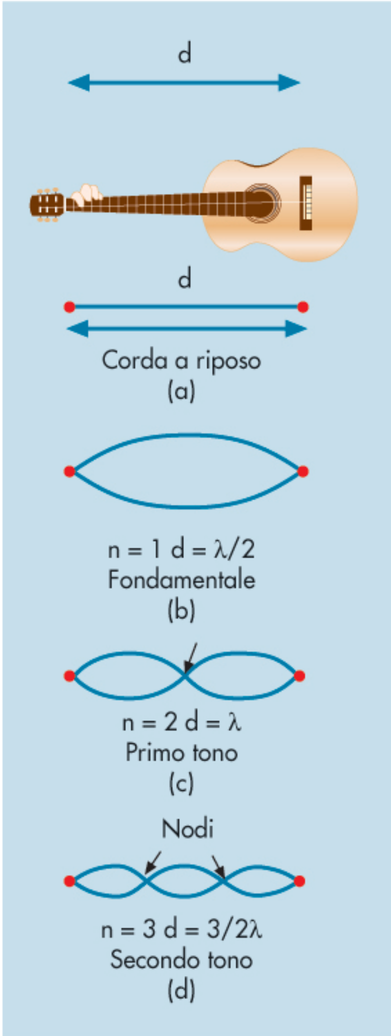
Equazione di Schrödinger

Nel 1926 E. Schrödinger propose un modello ondulatorio per la descrizione del comportamento di un elettrone nell'atomo di idrogeno.

Le onde si dividono in onde progressive e stazionarie a seconda che la loro ampiezza sia funzione dello spazio e del tempo o solo dello spazio.



Esempio di onda progressiva.



EdiSES
Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

Esempio di onda stazionaria.

Le onde stazionarie sono quelle la cui ampiezza dipende solo dalle coordinate spaziali x, y e z.

Vibrazioni di una corda di chitarra fissa alle due estremità.
a) corda di lunghezza d a riposo;
b) n=1: vibrazione fondamentale;
c) n=2: prima armonica;
d) n=3: seconda armonica.

Schrödinger descrisse il comportamento di un elettrone orbitante attorno al nucleo come quello di un'onda stazionaria.

Sapienza Università di Roma

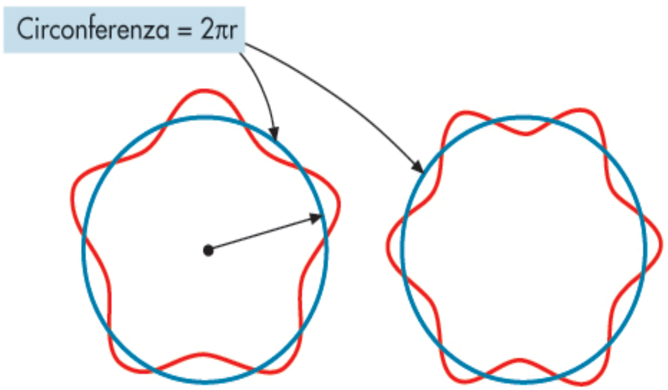
Schrödinger descrisse il comportamento di un elettrone orbitante attorno al nucleo come quello di un'onda stazionaria.

Propose, quindi, un'equazione, detta *equazione d'onda* con la quale rappresentare l'onda associata all'elettrone.

Schrödinger descrisse il comportamento di un elettrone orbitante attorno al nucleo come quello di un'onda stazionaria.

Propose, quindi, un'equazione, detta *equazione d'onda* con la quale rappresentare l'onda associata all'elettrone.

Tale onda potrebbe essere immaginata come ottenuta dalla vibrazione di una corda chiusa su se stessa:



$2\pi r = n\lambda$
dove n = 1, 2, 3, …

Onde stazionarie circolari:
a) n=5; b) n=6.

Le soluzioni di questa equazione, dette funzioni d’onda Ψ, non hanno un definito significato fisico, ma ad esse è associato un ben determinato valore dell’energia da confrontare con i valori ricavati sperimentalmente.

Le soluzioni di questa equazione, dette funzioni d’onda Ψ, non hanno un definito significato fisico, ma ad esse è associato un ben determinato valore dell’energia da confrontare con i valori ricavati sperimentalmente.

Matematicamente esistono infinite soluzioni di tale equazione.
Soltanto alcune, finite, soluzioni (autofunzioni) soddisfano determinati requisiti (vincoli) e sono, quindi, accettabili.

Sapienza Università di Roma

Le soluzioni di questa equazione, dette funzioni d'onda Ψ, non hanno un definito significato fisico, ma ad esse è associato un ben determinato valore dell'energia da confrontare con i valori ricavati sperimentalmente.

Matematicamente esistono infinite soluzioni di tale equazione. Soltanto alcune, finite, soluzioni (autofunzioni) soddisfano determinati requisiti (vincoli) e sono, quindi, accettabili.

In particolare, i vincoli della funzione d'onda Ψ possono esser così riassunti:

1) continua e finita
2) ad un sol valore in ogni punto dello spazio
3) deve tendere a 0 all'infinito
4) deve soddisfare la condizione di normalizzazione: $\int \Psi^2 \mathrm{d}V = 1$.

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2}\cdot V\,\psi\ = E\,\psi$$

soluzioni:

$$E=\frac{n^2\ h^2}{8\,m\,a^2}\quad \text{e} \quad \psi=\left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}}\text{sen}\left(\frac{2\,m\,E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot x$$

Un'onda stazionaria ha alle pareti un'ampiezza uguale a 0 e perché questo si verifichi la distanza a deve essere un multiplo intero di metà della lunghezza d'onda:

$a=n\,\dfrac{\lambda}{2}$ essendo inoltre $\lambda=\dfrac{h}{m\,v}$ si ha:

$$a=n\,\frac{h}{2\,m\,v}\ \rightarrow\ m\,v=\frac{n\,h}{2\,a}$$

$$E=\frac{1}{2}m\,v^2\quad =\frac{1}{2}\frac{m^2v^2}{m}\quad =\frac{1}{2}\,\frac{n^2h^2}{4\,a^2m}\quad =\frac{n^2h^2}{8\,m\,a^2}$$

Il movimento dell'elettrone orbitante attorno al nucleo è tridimensionale, per cui è caratterizzato da tre costanti, dette *numeri quantici*, indicate con n, l ed m.

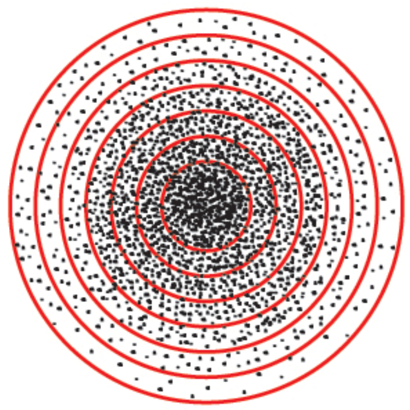
Il movimento dell'elettrone orbitante attorno al nucleo è tridimensionale, per cui è caratterizzato da tre costanti, dette *numeri quantici*, indicate con *n*, *l* ed *m*.

Relazione tra i numeri quantici

Numeri quantici			Nome comune dell'orbitale	Numero totale di orbitali	
n	l (0,...n–1)	m (–l,......,0,......l)			
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	
2	1	–1, 0, 1	2p	3	4
3	0	0	3s	1	
3	1	–1, 0, 1	3p	3	
3	2	–2, –1, 0, 1, 2	3d	5	9
4	0	0	4s	1	
4	1	–1, 0, 1	4p	3	
4	2	–2, –1, 0, 1, 2	4d	5	
4	3	–3, –2, –1, 0, 1, 2, 3	4f	7	16

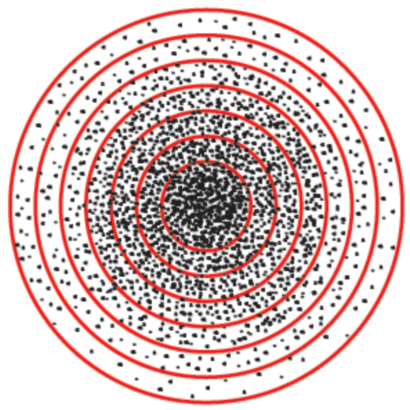
EdiSES
Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

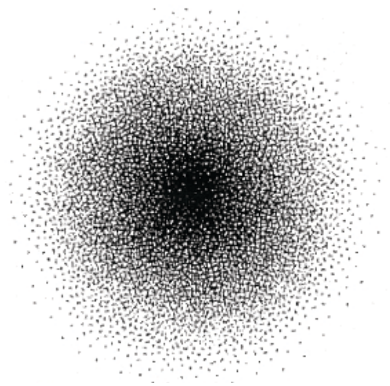


Distribuzione dei colpi su un bersaglio da tiro a segno.

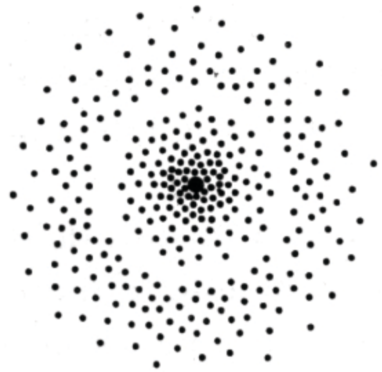
EdiSES
Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES



Distribuzione dei colpi su un bersaglio da tiro a segno.



Rappresentazione della nuvola di carica dell'orbitale 1s.

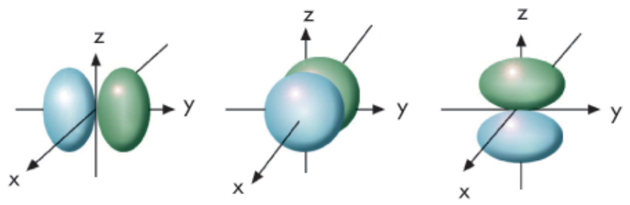


Rappresentazione della nuvola di carica dell'orbitale 2s.

EdiSES Palmisano, Schiavello *Fondamenti di Chimica* EdiSES

EdiSES Palmisano, Schiavello *Fondamenti di Chimica* EdiSES

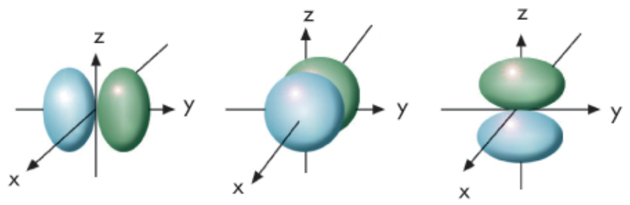
Rappresentazione dei 3 orbitali 2p secondo le loro superfici limite.

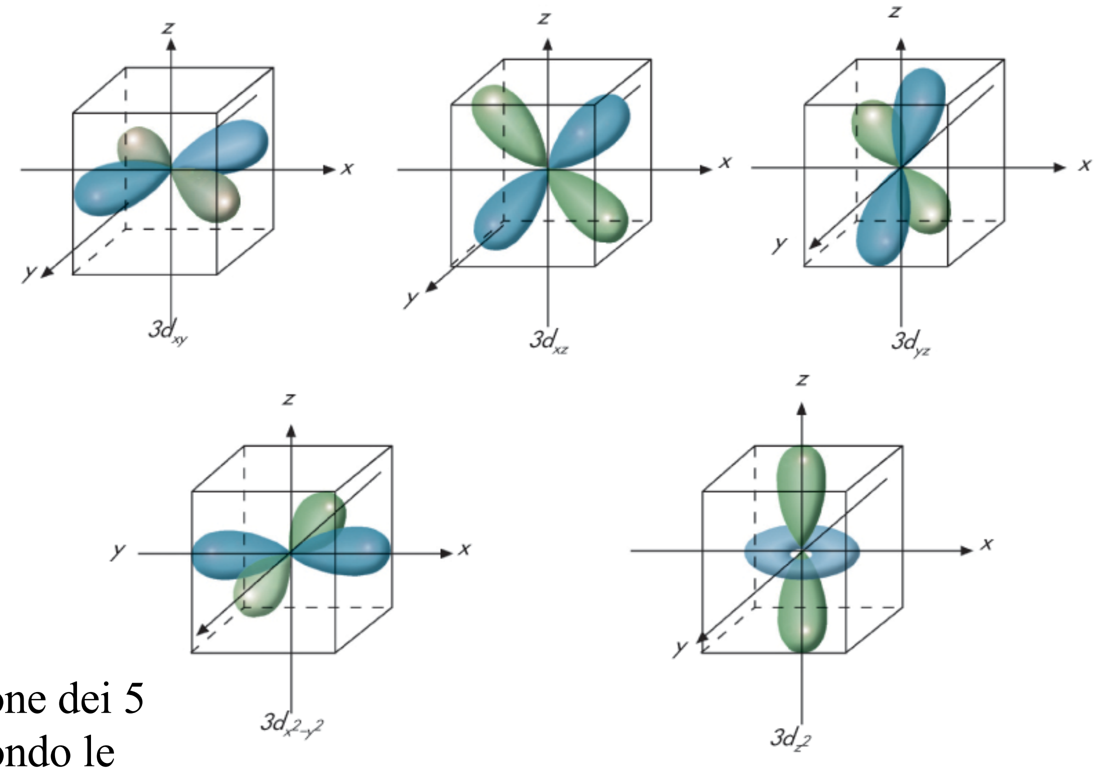


EdiSES
Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

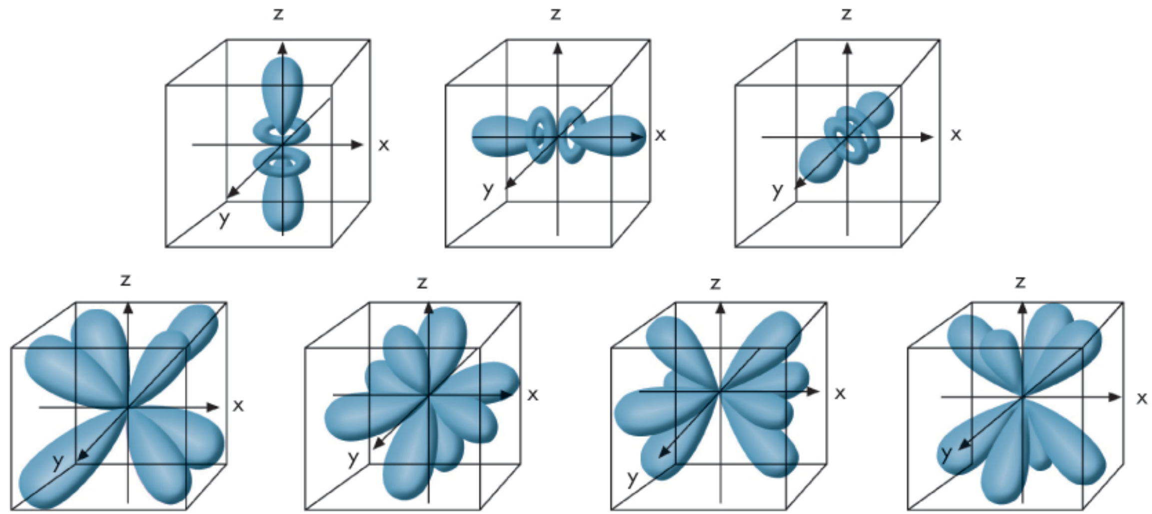
Rappresentazione dei 3 orbitali 2p secondo le loro superfici limite.





Rappresentazione dei 5 orbitali 3d secondo le loro superfici limite.

EdiSES
Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

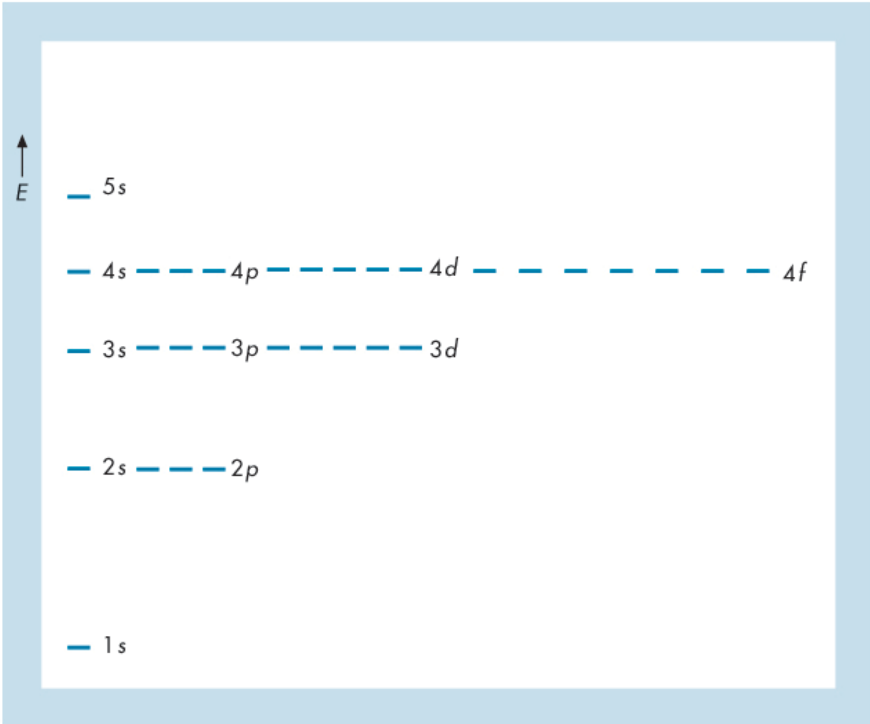


Rappresentazione dei 7 orbitali 4f
secondo le loro superfici limite.

EdiSES
Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

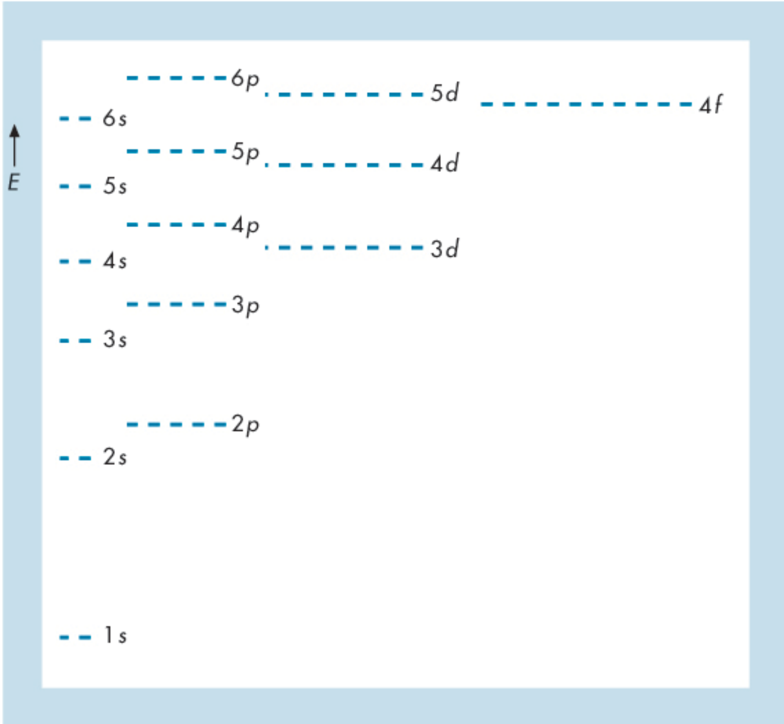
Schema dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno.



Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

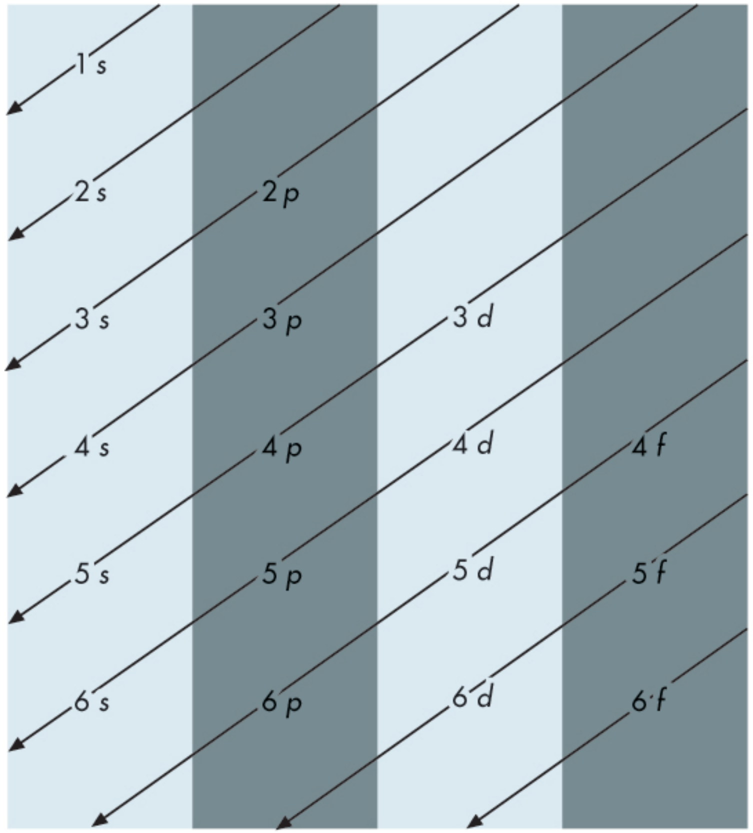
Successione dei livelli energetici negli atomi polielettronici.



Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Regola per ottenere la successione dei livelli energetici.



Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica
EdiSES

Nel 1928 P. Dirac, modificando l'equazione d'onda per l'elettrone, introdusse un quarto numero quantico, detto magnetico di spin (m_s), che può assumere soltanto due valori: +1/2 e –1/2.

Riassumendo avremo:

n	l	m	m_s
1	0	0	$\pm\ ^1/_2$
2	0	0	$\pm\ ^1/_2$
	1	− 1	$\pm\ ^1/_2$
		0	$\pm\ ^1/_2$
		+ 1	$\pm\ ^1/_2$
3	0	0	$\pm\ ^1/_2$
	1	− 1	$\pm\ ^1/_2$
		0	$\pm\ ^1/_2$
		+ 1	$\pm\ ^1/_2$
	2	− 2	$\pm\ ^1/_2$
		− 1	$\pm\ ^1/_2$
		0	$\pm\ ^1/_2$
		+ 1	$\pm\ ^1/_2$
		+ 2	$\pm\ ^1/_2$

Principio di esclusione di Pauli

In un atomo non possono coesistere elettroni aventi tutti e quattro i numeri quantici uguali.

Ciò implica che due elettroni che occupano lo stesso orbitale, e che, quindi hanno gli stessi valori di n, l ed m, debbono avere diversi valori di m_s. Dal momento che solo due valori di m_s sono possibili (+1/2 e –1/2) altro modo di enunciare tale principio è:

Ogni orbitale è occupato al più da due elettroni, ed essi debbono avere spin opposto.

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Principio di esclusione di Pauli

In un atomo non possono coesistere elettroni aventi tutti e quattro i numeri quantici uguali.

Ciò implica che due elettroni che occupano lo stesso orbitale, e che, quindi hanno gli stessi valori di n, l ed m, debbono avere diversi valori di m_s. Dal momento che solo due valori di m_s sono possibili (+1/2 e –1/2) altro modo di enunciare tale principio è:

Ogni orbitale è occupato al più da due elettroni, ed essi debbono avere spin opposto.

Principio di massima molteplicità di Hund

La configurazione di minima energia è quella che presenta il maggior numero di spin paralleli.

Ciò implica che due o più elettroni che occupano orbitali aventi stessa energia (*degeneri*), lo faranno in modo da occupare, a spin parallelo, il maggior numero di tali orbitali possibili. Gli eventuali elettroni eccedenti si disporranno a spin antiparallelo secondo il principio di esclusione.