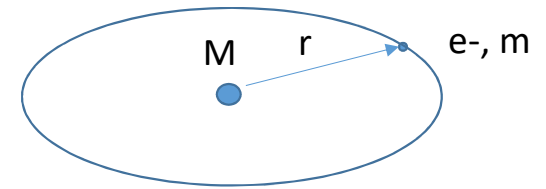


Formulazione di Schroedinger dell'atomo di idrogeno:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_e}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |R - r_e|}$$



Energia cinetica dei nuclei

degli elettroni

energia potenziale

Nota: Poiché l'**H non dipende esplicitamente dallo Spin dell'elettrone**, la funzione d'onda sarà esprimibile come prodotto della componente spaziale e di Spin:

$$\psi(q) = \chi_{s,m_s} \psi(r)$$

Dove χ_{m_s} sono gli autostati dell'operatore S ed S^2 con autovalori $s=1/2$ e $m_s=+-1/2$ (Note1) e $\psi(r)$ è soluzione dell'eq. Sch. :

$$H\psi(r) = E\psi(r)$$

Passando nel sistema di riferimento del centro di massa

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\mathbf{r} \text{ è la coordinata relativa } \mathbf{r}=\mathbf{r}_e-\mathbf{R})$$

Con $\mu=Mm/(M+m)$ massa ridotta del sistema.

Introducendo il momento angolare L possiamo riscrivere l'equazione di Sch. in coordinate polari come:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi) \quad \text{Vedi note (p5-9)}$$

Dove abbiamo raggruppato tutta la dipendenza angolare nell'operatore $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$

Le funzioni d'onda angolari (Le armoniche sferiche autofunzioni di L2 ed Lz):

Le funzioni d'onda angolari sono date dalle armoniche sferiche: $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Theta_{\ell, m}(\theta)$

Normalizzate da $\int |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 d\Omega = \int |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 \sin^2 \theta d\theta d\phi = 1$

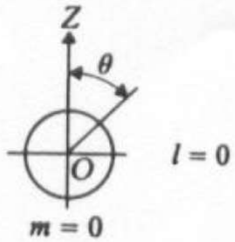
Le armoniche sferiche detescrivono la distribuzione angolare della carica nei vari orbitali (importante per la formazione e la direzionalità dei legami chimici).

Possiamo rappresentare un plot polare (eliminando la dipendenza da ϕ)

The first few spherical harmonics $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

m	Spherical harmonic $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$
0	$Y_{0,0} = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$
0	$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
± 1	$Y_{1,\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
0	$Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
± 1	$Y_{2,\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
± 2	$Y_{2,\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$
0	$Y_{3,0} = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
± 1	$Y_{3,\pm 1} = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$
± 2	$Y_{3,\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$
± 3	$Y_{3,\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$

Rappresentazione in un plot polare (eliminando la dipendenza da ϕ)



$$|Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2 = \frac{1}{2\pi} |\Theta_{l,m}(\theta)|^2$$

$$\begin{cases} \phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \\ |\phi_m(\phi)|^2 = \frac{1}{2\pi} \end{cases}$$

$\sim \text{Cos}^2(\theta)$

$\sim \text{Sin}^2(\theta)$



$\sim (\text{Sin}(\theta) \text{Cos}(\theta))^2$

$\sim \text{Sin}(\theta)^4$



2.6 Polar plots of the probability distributions $|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = (2\pi)^{-1} |\Theta_{lm}(\theta)|^2$

The first few spherical harmonics $Y_{lm}(\theta, \phi)$

m	Spherical harmonic $Y_{lm}(\theta, \phi)$
0	$Y_{0,0} = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$
0	$Y_{1,0} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
± 1	$Y_{1,\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
0	$Y_{2,0} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
± 1	$Y_{2,\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
± 2	$Y_{2,\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$
0	$Y_{3,0} = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
± 1	$Y_{3,\pm 1} = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$
± 2	$Y_{3,\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$
± 3	$Y_{3,\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$

Armoniche sferiche in forma reale:

-Si usano spesso per mostrare la direzionalità del legame chimico e sono autostati di L^2 ed L_z^2 (ma non di L_z , come $Y_{\ell m}$)

$$Y_{\ell, \cos}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} (Y_{\ell|m|} + Y_{\ell|m|}^*)$$

$$Y_{\ell, \sin}(\theta, \phi) = -\frac{i}{2} (Y_{\ell|m|} - Y_{\ell|m|}^*)$$

l	$ m $	Spherical harmonic in real form
0	0	$s = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$
1	0	$p_z = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
	1	$p_x = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$ $p_y = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$
2	0	$d_{3z^2-r^2} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	1	$d_{xz} = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$ $d_{yz} = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$
	2	$d_{x^2-y^2} = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$ $d_{xy} = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$

-La direzionalità della distribuzione di carica viene spesso mostrata mettendo in un grafico il valore dell'armonica in forma reale ($Y(\theta, \phi)$) per ogni direzione dello spazio

Palloncino

+

https://www.youtube.com/watch?time_continue=829&v=Sy464IGGdCM

https://www.youtube.com/watch?v=4z4QdiqP-q&t=0s&list=PLvW4qpQWIwuM1MafNyvBnJFf4Vqke_k-L&index=3

Notazione spettroscopica:

Gli orbitali si identificano con il valore l del momento angolare:

$0=s$; $1=p$; $2=d$; $3=f$;...

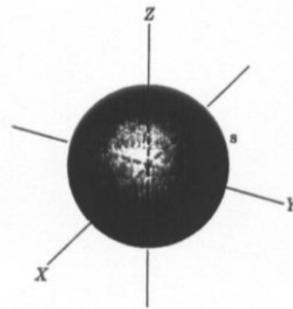


Fig. 3-9. Angular wave function for s-states ($l = 0$).

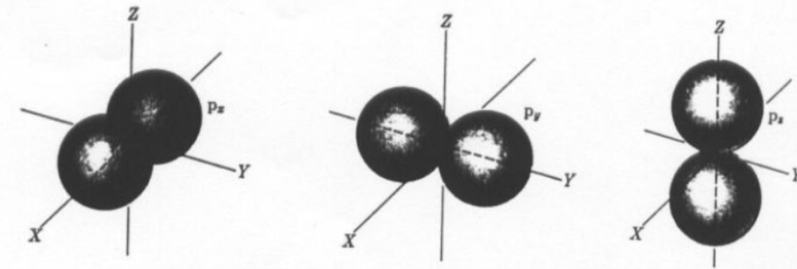
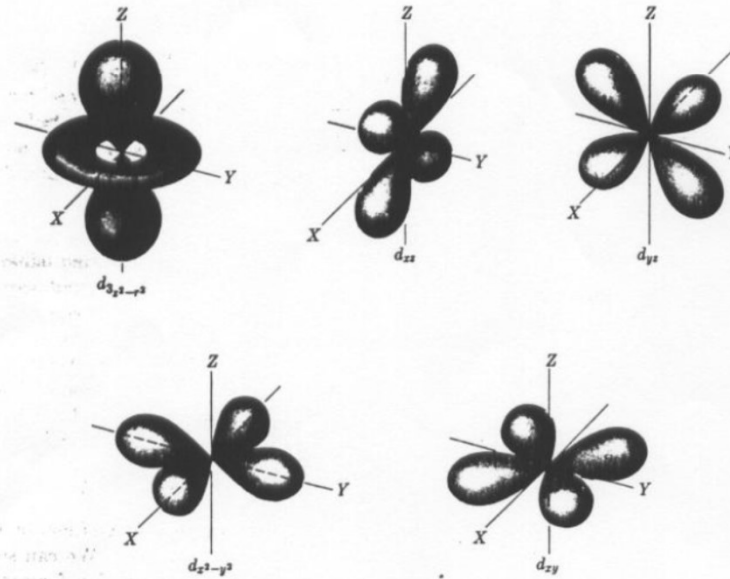


Fig. 3-10. Angular wave functions for p-states ($l = 1$).



Proprietà delle armoniche sferiche:

-La distribuzione mediata da tutti gli stati degeneri m : $\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2$, ha simmetria sferica

=> La distribuzione di carica mediata su tutti gli stati degeneri ha simmetria sferica se il potenziale ha simmetria sferica (m degeneri per tutti i potenziali centrosimmetrici!)

=> per misurare una distribuzione di carica di un orbitale ad m definito dobbiamo introdurre un campo (elettrico o magnetico) che rimuova la simmetria sferica

- $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ ha parità $(-1)^{\ell}$

⇒ Autofunzioni con ℓ pari sono pari per trasformazioni $r \rightarrow -r$

⇒ Autofunzioni con ℓ dispari sono dispari per trasformazioni $r \rightarrow -r$

Introducendo il momento angolare L possiamo riscrivere l'equazione di Sch. in coordinate polari come:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi) \quad \text{Vedi note (p5-9)}$$

Dove abbiamo raggruppato tutta la dipendenza angolare nell'operatore $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

Si dimostra in maniera semplice che $[H, L_z] = [H, L^2] = 0$ (sia il momento angolare totale che le sue proiezioni sono conservate)

E di conseguenza le autofunzioni possono essere scritte nella forma:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Dove abbiamo introdotto le armoniche $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ che vengono definite come le autofunzioni simultanee di
degli operatori L^2 ed L_z e che quindi soddisfano le eq. agli autovalori:

$$L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$L_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Con il numero quantico magnetico m che assume $2\ell+1$ valori compresi tra $-\ell < m < \ell$, per ogni valore del momento angolare ℓ

Componente Radiale della funzione d'onda:

Mentre le funzioni $R(r)$ e gli autovalori di energia si possono ricavare risolvendo l'equazione Radiale (vedi note Radial)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = ER(r)$$

Sostituendo $R(r) = X(r)/r$ si ottiene un'equazione:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{V(r)} \right] u(r) = E u(r)$$

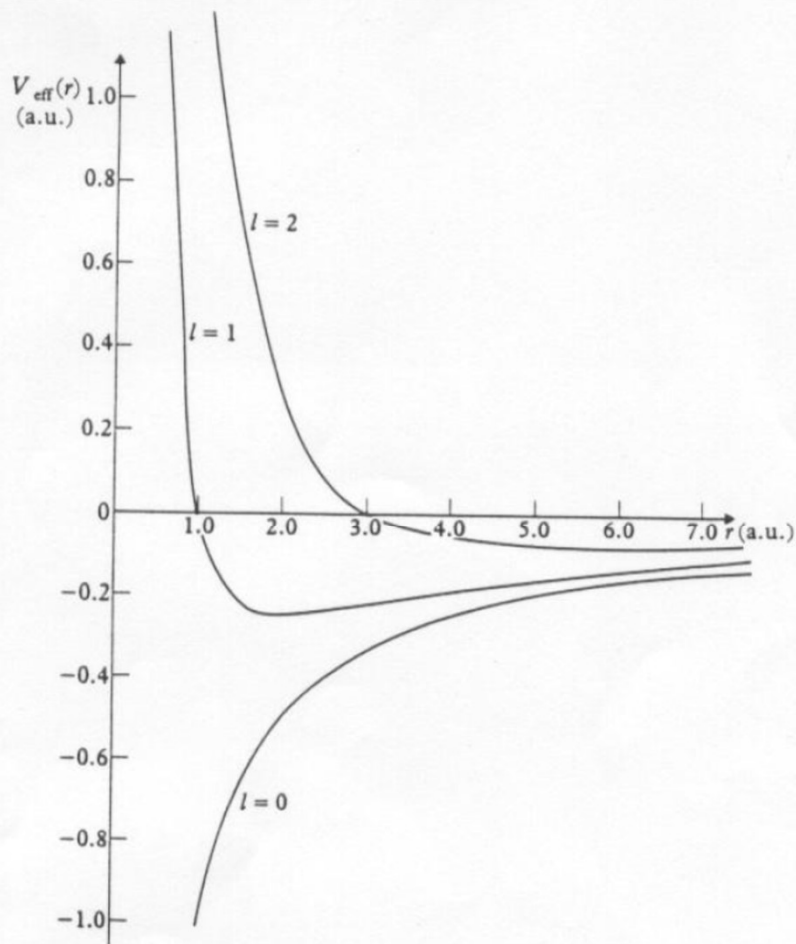
$V(r)$ è un potenziale coulombiano «schermato/corretto»
Della forza centrifuga degli elettroni con $\ell \neq 0$

Normalizzazione:

$$\int |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 d\Omega dr = 1 = \int |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 d\Omega$$

$$\int |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 d\Omega \int |R(r)|^2 r^2 dr = \int |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\int |X(r)|^2 dr = 1$$



3.1 The effective potential $V_{\text{eff}}(r)$ given by [3.9], for the case $Z = 1$ and $\mu = m$, and the values $l = 0, 1, 2$. Atomic units are used (see Appendix 11), so that $V_{\text{eff}}(r)$ is expressed in units $e^2/(4\pi\epsilon_0 a_0)$ and r in units of a_0 , where a_0 is the Bohr radius [1.86].

- Il sistema sarà legato solo con $E < 0$
- Per $E > 0$ il sistema non ammetterà stati legati discreti
- Per $r \rightarrow 0$ il potenziale è attrattivo solo per $l=0$; per $l \neq 0$ è maggiormente repulsivo per l maggiori.

=> La probabilità di trovare un e^- in zero sarà tanto più piccola tanto più grande è l

Le soluzioni all'equazione Radiale sono analitiche (vedi note) e possono essere scritte con i polinomi di Laguerre associati.

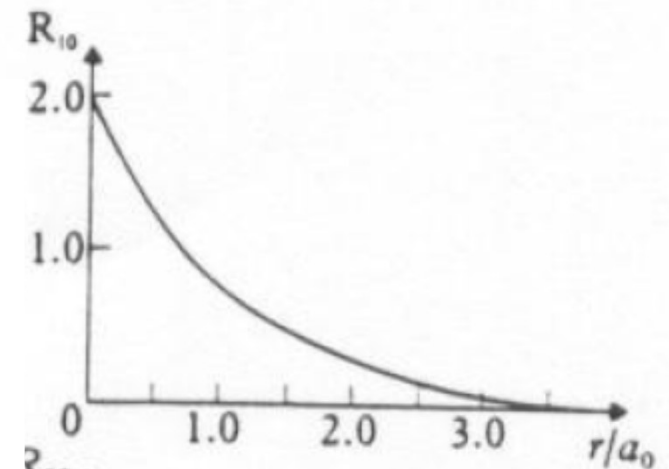
Vengono etichettate con i valori dei numeri quantici principale (n) e di momento angolare (ℓ);

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad \text{Con } \rho = 2Zr/na_{\mu} \quad \text{ed } a_{\mu} = a_0 m/\mu \quad (\text{Con } a_0 \text{ raggio di Bohr})$$

Con $n=1,2,\dots$ ed $\ell=0,\dots,n-1$

Le prime funzioni d'onda radiali per n ed ℓ piccoli

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$$



Le soluzioni all'equazione Radiale sono analitiche (vedi note) e possono essere scritte con i polinomi di Laguerre associati.

Vengono etichettate con i valori dei numeri quantici principale (n) e di momento angolare (ℓ);

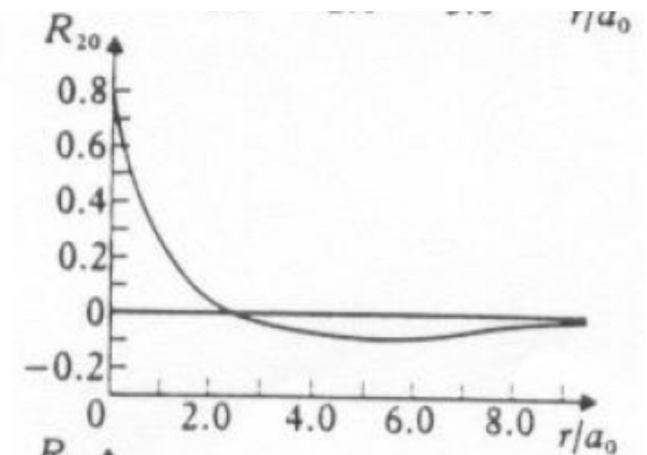
$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad \text{Con } \rho = 2Zr/na_{\mu} \quad \text{ed } a_{\mu} = a_0 m/\mu \quad (\text{Con } a_0 \text{ raggio di Bohr})$$

Con $n=1,2,\dots$ ed $\ell=0,\dots,n-1$

Le prime funzioni d'onda radiali per n ed ℓ piccoli

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$$

$$R_{20}(r) = 2(Z/2a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$



Le soluzioni all'equazione Radiale sono analitiche (vedi note) e possono essere scritte con i polinomi di Laguerre associati.

Vengono etichettate con i valori dei numeri quantici principale (n) e di momento angolare (ℓ);

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad \text{Con } \rho = 2Zr/na_0 \quad \text{ed} \quad \text{(Con } a_0 \text{ raggio di Bohr)}$$

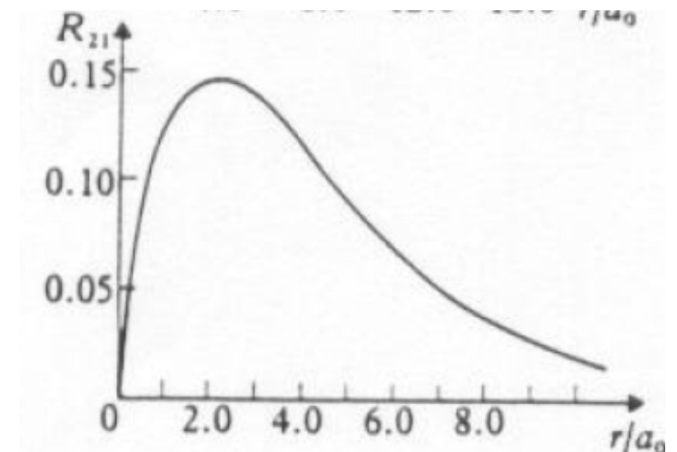
$$\text{Con } n=1,2,\dots \text{ ed } \ell=0,\dots,n-1$$

Le prime funzioni d'onda radiali per n ed ℓ pic

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$$

$$R_{20}(r) = 2(Z/2a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (Z/2a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$



Le soluzioni all'equazione Radiale sono analitiche (vedi note) e possono essere scritte con i polinomi di Laguerre associati. Vengono etichettate con i valori dei numeri quantici principale (n) e di momento angolare (ℓ);

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad \text{Con } \rho = 2Zr/na_{\mu} \quad \text{ed } a_{\mu} = a_0 m/\mu \quad (\text{Con } a_0 \text{ raggio di Bohr})$$

Con $n=1,2,\dots$ ed $\ell=0,\dots,n-1$

Le prime finzioni d'onda radiali per n ed ℓ piccoli

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$$

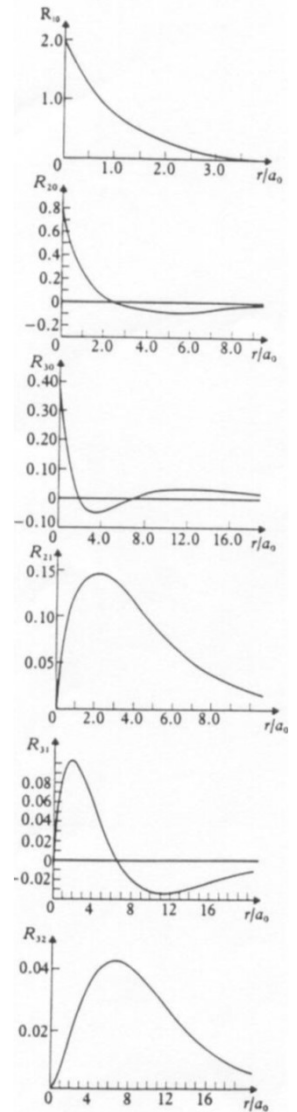
$$R_{20}(r) = 2(Z/2a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (Z/2a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$

$$R_{30}(r) = 2(Z/3a_0)^{3/2} (1 - 2Zr/3a_0 + 2Z^2 r^2/27a_0^2) \exp(-Zr/3a_0)$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{9} (Z/3a_0)^{3/2} (1 - Zr/6a_0)(Zr/a_0) \exp(-Zr/3a_0)$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}} (Z/3a_0)^{3/2} (Zr/a_0)^2 \exp(-Zr/3a_0)$$



Le soluzioni all'equazione Radiale sono analitiche (vedi note) e possono essere scritte con i polinomi di Laguerre associati. Vengono etichettate con i valori dei numeri quantici principale (n) e di momento angolare (ℓ);

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad \text{Con } \rho = 2Zr/na_{\mu} \quad \text{ed } a_{\mu} = a_0 m/\mu \quad (\text{Con } a_0 \text{ raggio di Bohr})$$

Con $n=1,2,\dots$ ed $\ell=0\dots n-1$

Le prime finzioni d'onda radiali per n ed ℓ piccoli

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$$

$$R_{20}(r) = 2(Z/2a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (Z/2a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0)$$

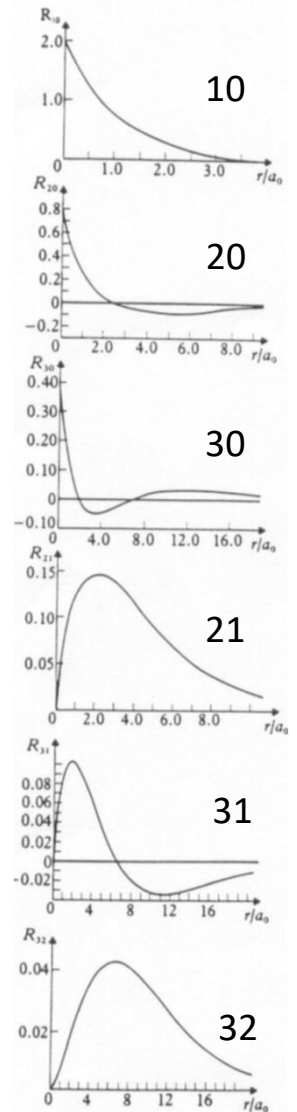
$$R_{30}(r) = 2(Z/3a_0)^{3/2} (1 - 2Zr/3a_0 + 2Z^2 r^2/27a_0^2) \exp(-Zr/3a_0)$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{9} (Z/3a_0)^{3/2} (1 - Zr/6a_0)(Zr/a_0) \exp(-Zr/3a_0)$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}} (Z/3a_0)^{3/2} (Zr/a_0)^2 \exp(-Zr/3a_0)$$

Note:

- Solo per $\ell=0$ la funzione d'onda è $\neq 0$ nell'origine
- Per $\ell \neq 0$ la funzione d'onda per r piccoli è proporzionale a r^ℓ . Questo termine «forza» la probabilità a rimanere piccola nell'origine (termine repulsivo nell'H prop. a $\ell(\ell+1)$)
- Il polinomio di Laguerre ha n_r zeri ($n_r = n - \ell - 1$)
- \Rightarrow La densità ha $n - \ell$ massimi
- Per un dato n orbitali con ℓ maggiore sono più grand



Le funzioni d'onda spaziali sono quindi definite dai tre numeri quantici n, ℓ ed m

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

E gli autovalori in energia sono dati da

$$E_n = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad \text{Con} \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \quad \text{costante di struttura fine.}$$

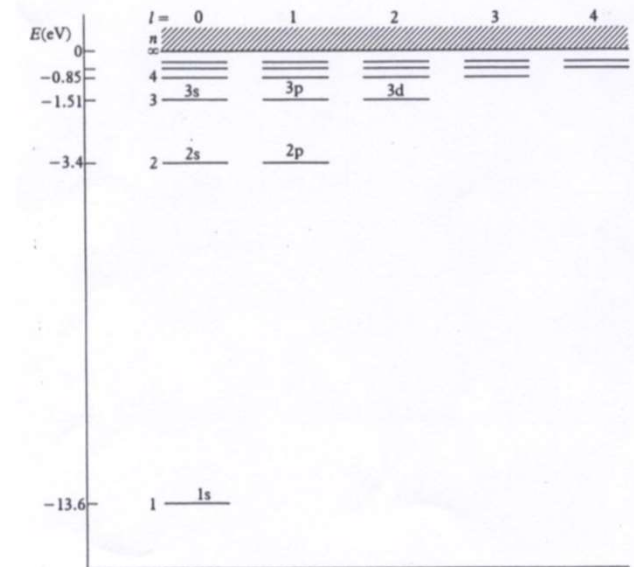
Che possono essere espressi come:

$$E_n = -R(\mu) \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{\mu}{m} R_\infty \frac{Z^2}{n^2} \quad \text{Dove} \quad R_\infty = 109737 \text{ cm}^{-1} = 13.6 \text{ eV} = 2.17 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Possiamo notare:

- 1) Sono presenti infiniti livelli discreti -> Il potenziale Coulombiano tende a 0 lentamente => i livelli si infittiscono all' ∞
- 2) Gli autovalori di energia dipendono solo dal numero quantico n e coincidono con quelli ricavati nel modello di Bohr

è la costante di Rydberg (con M nucleo ∞)



3.2 Energy-level diagram for atomic hydrogen.

3) Gli stati risultano degeneri in ℓ ed m

-Degenerazione in m dovuta alla simmetria dello spazio (il valore di energia non può dipendere dal momento angolare)

-Degenerazione in ℓ è «accidentale»: dipende dalla dipendenza $1/r$ del potenziale Coulombiano

4) La degenerazione dei livelli energetici è quindi data da:

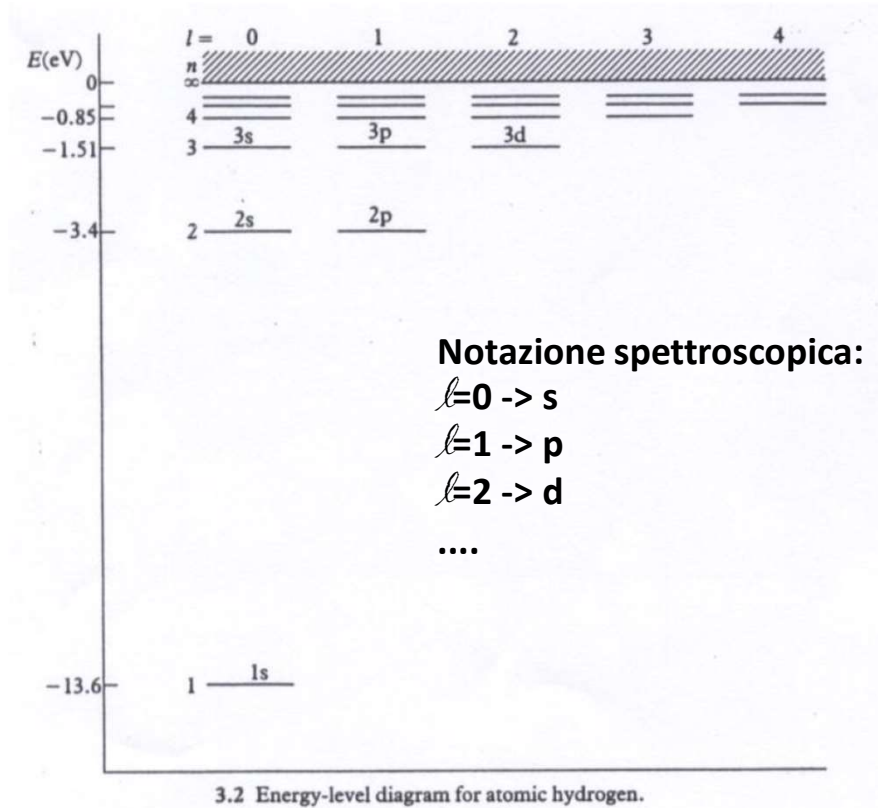
$d=2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = 2n^2$ dove abbiamo considerato che $\ell=0 \dots n-1$ e per ogni valore di ℓ abbiamo $2\ell+1$ valori di m possibili e la degenerazione di spin ($m_s = -1/2$ e $1/2$).

Riassumendo la funzione d'onda può essere espressa come

$$\psi(\mathbf{q}) = \chi_{m_s} \psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \chi_{m_s} R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Che abbiamo costruito come l'autofunzione simultanea degli operatori, H, L^2, L_z, S^2, S_z tre numeri quantici n, ℓ ed m, m_s sono legati dalle relazioni:

- $n=1, 2, 3, \dots$
- $\ell=0, \dots, n-1$
- $m=-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$
- $m_s = -1/2, 1/2$



Significato della funzione d'onda elettronica e la densità di carica: $\rho(\mathbf{r}) = -e |\Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})|^2$

Abbiamo già visto come l'indeterminazione non consenta di definire delle orbite definite, ma la distribuzione di carica è discussa solo in termini probabilistici ->

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{2\pi m} \Rightarrow \Delta x \geq \frac{h}{2\pi m \Delta v} \Rightarrow \Delta x \geq \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{6,28 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 0,2 \cdot 10^6} m \Rightarrow \Delta x \geq 5 \cdot 10^{-10} m$$

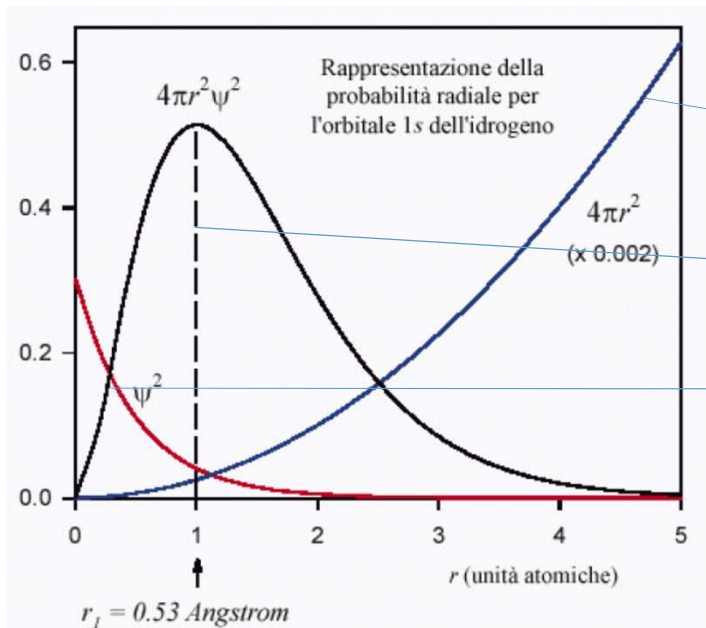
$|\Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ = probabilità di trovare una carica nell'elemento di volume $d\mathbf{r}$

Con indeterminazione delle v del 10% $\Delta x >$ dell'atomo

$|\Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})|^2$ = è la densità di probabilità di trovare una carica nell'elemento di volume $d\mathbf{r}$

Per trovare la densità di carica Radiale dobbiamo integrare sul volume.

Esempio, qual'è la densità di carica radiale di un atomo di H nel ground state?



$$\Psi_{n=0,l=0,m=0}(r, \theta, \phi) = R_{00}Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_\mu}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_\mu}$$

Volume guscio sferico $4\pi r^2 dr$

Raggio più probabile al quale si può incontrare l'elettrone $r=a_0$

La probabilità è maggiore di trovare l'e- sul nucleo ma l'elemento di volume cresce più rapidamente dell'esponenziale

La probabilità che un elettrone si trovi ad una distanza dal nucleo è data da:

$$D_{nl}(r)dr = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta 4\pi r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 dr = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta 4\pi |Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2 |R_{nl}|^2 r^2 = |R_{nl}|^2 (r) r^2$$

Alcune osservazioni importanti:

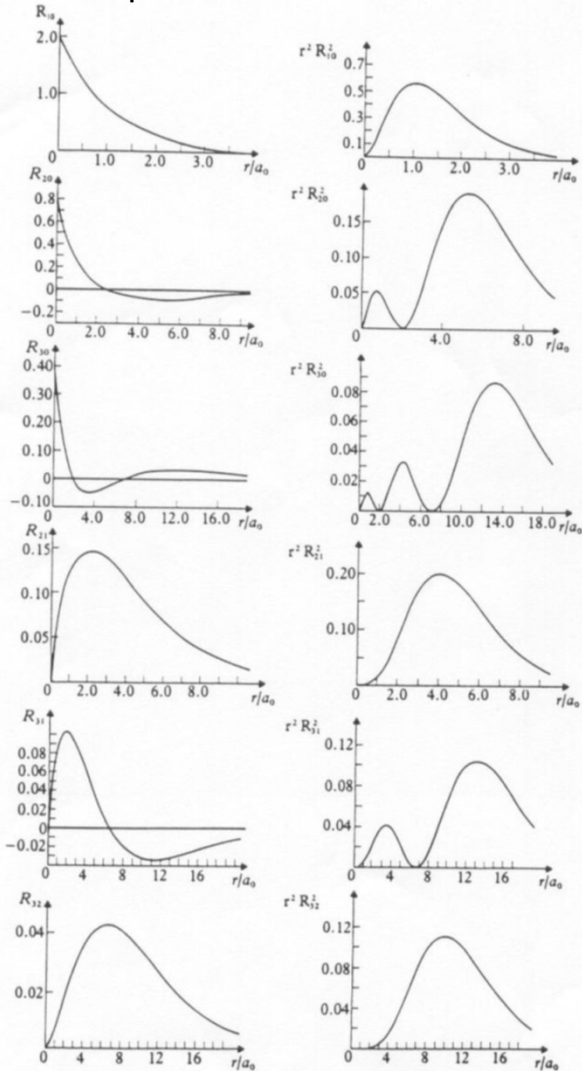
1) Solo per gli stati $l=0$ la densità è diversa da 0 nell'origine.

$$|\psi_{n00}| = \frac{1}{4\pi} |R_{n0}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_{\mu}^3 n^3}$$

Nota: Importante per struttura fine, i.e. Interazione tra nucleo ed elettroni

2) Per $l \neq 0$ è proporzionale a R_{nl} è proporzionale a r^l e quindi la funzione d'onda resta piccola per distanze crescenti dal nucleo con l (effetto del potenziale schermato dal termine repulsivo $l(l+1)$)

3) Le funzioni d'onda (polinomi di Laguerre) avrà $n-l-1$ zeri e $n-l$ massimi



3.3 Radial functions $R_{nl}(r)$ and radial distribution functions $r^2 R_{nl}^2(r)$ for atomic hydrogen.