

Atomi

Momento angolare: riassunto

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$L_x = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$L_y = z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$L_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Non commutazione delle componenti:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

Non è possibile misurare simultaneamente due componenti di \mathbf{L} .

Commutazione di una componente col quadrato:

$$[L^2, L_{x,y,z}] = 0$$

È possibile misurare simultaneamente L^2 e una componente di \mathbf{L} .

Autofunzioni simultanee di L^2 e L_z :
armoniche sferiche, $Y_l^m(\theta, \phi)$

Autovalori quantizzati:

$$L^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \psi$$

$$l = 0, 1, 2, \dots \text{ per le armoniche sferiche}$$

$$L_z \psi = m\hbar \psi$$

$$-l \leq m \leq l$$

Table 4.2: The first few spherical harmonics, $Y_l^m(\theta, \phi)$.

$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$Y_2^{+2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{+2i\phi}$
$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	$Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$Y_1^{\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 1} = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$Y_3^{\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_2^{\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$

Tabella da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

Momento angolare: coordinate sferiche

È possibile misurare simultaneamente L^2 e una componente di \mathbf{L} .

Esistono ψ t.c.

$$L^2 \psi = \omega_l \hbar^2 \psi$$

$$L_z \psi = m \hbar \psi$$

\hbar tiene conto delle dimensioni

con

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

In coordinate sferiche: $\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$

e gli operatori sono dati da:

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

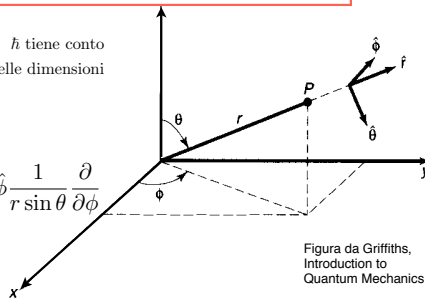


Figura da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

Eq. di Schrödinger in un potenziale centrale

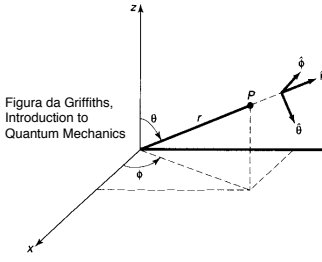


Figura da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

Perché un potenziale centrale?
È la prima approssimazione (esatta per l'H) per un potenziale atomico!

Sia $V=V(r)$ un potenziale a simmetria sferica (dipendente solo dalla distanza da un punto -origine-).

L'equazione di Schroedinger si può scrivere in coordinate polari:

$$\frac{1}{2mr^2} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + L^2 \right] \psi + V(r)\psi = E\psi$$

Si può risolvere come per il momento angolare per separazione di variabili.

Gli stati stazionari (autofunzioni dell'Hamiltoniana) sono:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

dove le $R(r)$ sono funzioni della sola r , e le $Y_l^m(\theta, \phi)$ sono le armoniche sferiche.

$\hat{H}, \mathbf{L}^2, L_z$ sono simultaneamente misurabili.

$V(r)$ influenza esclusivamente la dipendenza radiale $R(r)$.

Potenziale centrale: proprietà generali

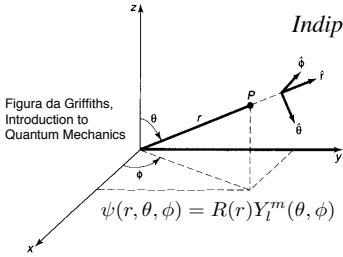


Figura da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

Indipendentemente dalla forma esatta del potenziale:

Esistono due famiglie di soluzioni:

$E > 0$: stati di diffusione.

$E < 0$: stati legati

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

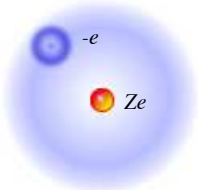
$E < 0$: stati legati

Per r "grande" (soluzione asintotica): $R_\infty(r) = \frac{c}{r} e^{-\kappa r}$
con $-\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

La densità di probabilità è: $|R_\infty(r)|^2 = \frac{|c|^2}{r^2} e^{-2\kappa r}$

ovvero la particella è localizzata in una sfera di raggio dell'ordine di $\sim \frac{1}{\kappa}$

Atomo idrogenoide: stati legati



Atomo con un elettrone e Z protoni: $V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$
(Z : numero atomico)
(caso particolare di potenziale centrale)

Risolviendo l'equazione di Schrödinger

$E < 0$: stati legati $\rightarrow E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} Z e^2 \frac{Z e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}$

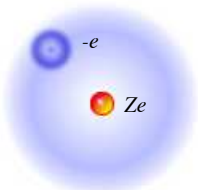
$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m}$ è proprio il raggio di Bohr!

\rightarrow quantizzazione delle energie degli stati legati.

In un atomo idrogenoide ritrovo con un calcolo quantistico la formula di Bohr, con un raggio ridotto di un fattore Z . ($Z=1$ nell'idrogeno)

Energia di ionizzazione: l'energia dello stato fondamentale ($n = 1$): $E(n = 1) = -13.6eV$

Atomo idrogenoide: stati legati



Atomo con un elettrone e Z protoni: $V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$
(Z: numero atomico)

$E < 0$: stati legati

$$\rightarrow E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} Ze^2 \frac{Ze^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Funzione d'onda: $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$

derivata (2l+1)-esima del polinomio di Laguerre (n+1)-esimo

L'espressione finale per R(r) è: $R_{n,l}(r) = N_{n,l} e^{-\kappa_n r} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_n r)$
normalizzazione $\kappa_n = n \frac{a_0}{Z}$

La fdo dipende da TRE numeri quantici: n, l, m.

Le energie permesse dipendono solo da n (potenziale idrogenoide): sono *degeneri* in l e in m.

Dal calcolo della fdo si ottengono le limitazioni sui numeri quantici:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots \\ 0 &\leq l \leq n-1 \\ -l &\leq m \leq l \end{aligned}$$

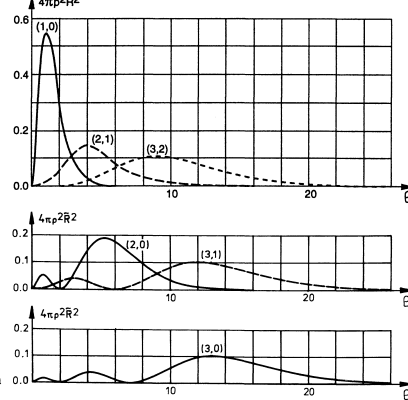
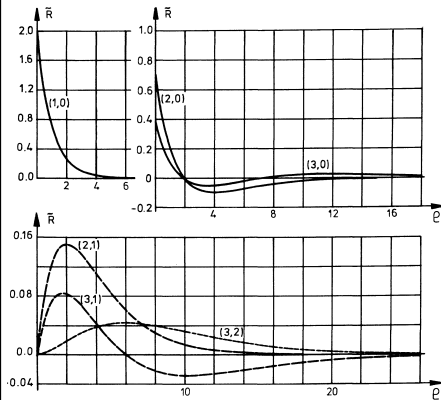
Fdo radiale

$$R_{n,l}(r) = N_{n,l} e^{-\kappa_n r} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_n r)$$

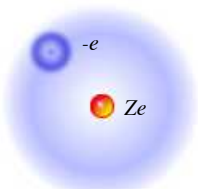
$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots \\ 0 &\leq l \leq n-1 \\ -l &\leq m \leq l \end{aligned} \quad E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{a_0} \frac{1}{n^2}$$

fdo $\tilde{R}(\rho)$

densità di probabilità $4\pi\rho^2 |\tilde{R}(\rho)|^2$



Quantizzazione delle energie



$E < 0$: stati legati $R(\rho) = e^{-\rho/2} v(\rho)$

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{a_0} \frac{1}{n^2}$$

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots \\ 0 &\leq l \leq n-1 \\ -l &\leq m \leq l \end{aligned}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m}$$

Le energie permesse dipendono solo da n: sono *degeneri* in l e in m.

Livelli idrogenoidi: n^2 degeneri (in l ed m).

La condizione di degenerazione in l dipende dalla forma del potenziale: per potenziali diversi da $1/r$ (ma ancora sfericamente simmetrici) i livelli si separano.

Questo è quanto accade in un atomo con più elettroni.

Invece, la condizione di degenerazione in m dipende dalla invarianza per rotazioni: viene rimossa solo applicando un potenziale non a simmetria sferica.

Esempio: un campo di induzione magnetica \rightarrow effetto Zeeman
un campo elettrostatico \rightarrow effetto Stark

Un programma per visualizzare orbitali atomici:
<http://daugerresearch.com/orbitals/index.shtml>
 (solo Mac e iPhone (!))

Modifica dei livelli.

Atomo idrogenoide imperturbato: $E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} Z e^2 \frac{Z e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e^2}{a_0} \frac{Z}{n^2}$

Le energie permesse dipendono solo da n : sono *degeneri* in l e in m . (n^2 stati per ogni n)

Degenerazioni rimosse, in toto o in parte:
 il numero di livelli aumenta, il numero di transizioni possibili aumenta.
 Lo spettro diventa più complesso, ma reca anche più informazione.

Isotopi: spostano le righe, non ne variano il numero.

Potenziale non $1/r$: rimuove la degenerazione in l .
 Pressoché in tutti gli atomi (a parte l'H)!

Accoppiamento **S L** (spin-orbita): accoppia i momenti angolari, introduce il momento angolare totale **J**, e ne rimuove la degenerazione.

Campi esterni: introducono una direzione preferenziale, rimuovono la degenerazione in m .

.....

Esempio di rimozione della degenerazione in l : metalli alcalini e potenziale efficace

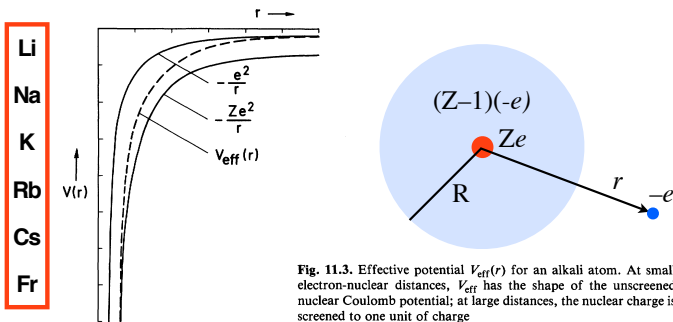


Figura da H. Haken, H.C. Wolf, "The Physics of Atoms and Quanta - Introduction to Experiments and Theory", 7th revised edition, Springer Berlin Heidelberg, 2005.

modello elementare: problema a molti corpi (Z elettroni, nucleo Ze) \rightarrow problema efficace: un elettrone di valenza nella distribuzione di carica efficace del sistema nucleo+altri elettroni.

Potenziale $1/r$ solo a grandi distanze, "schermato" a piccole distanze:

rimozione della degenerazione di momento angolare

I livelli acquistano una dipendenza da l
 ("difetto quantico", non analiticamente calcolabile):

$$E_{n,l} \propto -\frac{1}{[n - \Delta(n, l)]^2}$$

Nomenclatura e (alcune) proprietà

Numeri quantici

n	principale	energia
l	orbitale	momento angolare
m	magnetico (orbitale)	componente del momento angolare
m_s	magnetico (spin)	(componente dello) spin

↓
per elettroni, non si menziona esplicitamente lo spin, poiché $S=1/2$.

dipendono dall'esistenza di una direzione privilegiata (ad es., un campo esterno)

Vincoli:

n	= 1, 2, 3,	n valori
l	= 0, 1, ... $n-1$	$2l+1$ valori
m	= $-l, -l+1, \dots, l-1, l$	2 valori (per elettroni)
m_s	= $-1/2, 1/2$	(in generale: $-S, -S+1, \dots, S-1, S$ $2S$ valori)

Attenzione: nei sistemi atomici alcuni numeri quantici si riferiscono al *sistema* (vengono dalla soluzione dell'equazione di Schroedinger), sebbene sia uso assegnarli a un elettrone

Risulta che è possibile continuare a descrivere atomi complessi e molecole con l'ausilio dei numeri quantici suddetti

Proprietà degli orbitali.

In un orbitale possono essere collocati non più di due elettroni, differenti fra loro per (la proiezione del)lo spin m_s (conseguenza del principio di Pauli).

Principio di esclusione di Pauli:
Due particelle la cui fdo sia antisimmetrica non possono occupare simultaneamente lo stesso stato quantico.

Gli elettroni sono fermioni, per i quali la fdo è antisimmetrica.

Quando vi sono orbitali di uguale energia (degenerazione), gli elettroni vi trovano posto in maniera da massimizzare il numero di essi con spin paralleli (**Regola di Hund**)

Nomenclatura.

Uno stato di un elettrone definito da n, l, m è detto **orbitale**.

L'insieme degli orbitali a dato n è detto **shell** (guscio, strato).

L'insieme degli orbitali a dati n e l è detto **subshell** (sottostrato).

Nella notazione degli orbitali atomici, il numero n viene indicato con

$l = 0$: stato "s" ("sharp")
 $l = 1$: stato "p" ("principal")
 $l = 2$: stato "d" ("diffuse")
 $l = 3$: stato "f" ("fundamental")

g
h
i
...

l il suo numero
le lettere s, p, d, f, g, h, \dots

Il numero di elettroni in ciascuna subshell è indicato con un apice alla lettera della subshell.

Esempio: il berillio (Be) ha 4 elettroni, lo schema a shell fornisce $1s^2 2s^2$

Una shell o subshell in cui è collocato il massimo numero di elettroni possibile è detta **completa**.

Schema (grossolano) della struttura a livelli: tavola periodica

		1s	2s	2p	3s
1	H	↑			
2	He	↑↓			
3	Li	↑↓	↑		
4	Be	↑↓	↑↓		
5	B	↑↓	↑↓	↑	
6	C	↑↓	↑↓	↑↑	
7	N	↑↓	↑↓	↑↑↑	
8	O	↑↓	↑↓	↑↓↑↑	
9	F	↑↓	↑↓	↑↓↑↓↑	
10	Ne	↑↓	↑↓	↑↓↑↓↑↓	
11	Na	↑↓	↑↓	↑↓↑↓↑↓	↑
...					

regola di Hund

Atomi a molti elettroni (cenni)

Generalità

Molti (≥ 2) elettroni:

più elettroni coinvolti nelle transizioni, non solo shell+subshell+un elettrone

- principio di Pauli
- somma dei momenti angolari
- composizione degli spin di più elettroni: spin totale
- Meccanismo di accoppiamento di momenti angolari
- rimozione delle degenerazioni.

Momenti angolari

In atomi a un elettrone: l ed s possono combinarsi a fornire j .

Notazione:
lettere minuscole, momenti angolari relativi a un elettrone
LETTERE MAIUSCOLE, momenti angolari relativi a sistemi

l'accoppiamento avviene tramite le mutue interazioni, ad es. magnetiche.

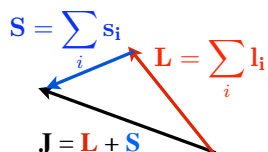
Due casi limite:

- Accoppiamento LS (Russel-Saunders): gli l_i dei vari elettroni si combinano a fornire L , similmente gli s_i si combinano in S , e sono i due momenti risultanti a combinarsi fra loro.
- Accoppiamento jj : ogni l_i di ciascun elettrone si combina con s_i a formare j_i . I momenti angolari così composti di ciascun elettrone si combinano a formare J .

Accoppiamento $L S$ (Russel-Saunders)

- Accoppiamento LS (Russel-Saunders): gli l_i dei vari elettroni si combinano a fornire L , similmente gli s_i si combinano in S , e sono i due momenti risultanti a combinarsi fra loro.

$$V(\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) \ll V(\vec{l}_i \cdot \vec{l}_j), V(\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j)$$



Composizione: valgono le regole usuali.

Ad esempio, per $i=1,2$:

con modulo:

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$$
$$|L| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

e con il numero quantico dato da:

$$L = l_1 - l_2, l_1 - l_2 + 1, \dots, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2, \quad l_1 \geq l_2$$

Si ricordi che, per due vettori \mathbf{a} e \mathbf{b} ,

$$|\vec{a} + \vec{b}|^2 = |\vec{a}|^2 + |\vec{b}|^2 + 2\vec{a} \cdot \vec{b}$$

Notazione: similmente alle configurazioni a un elettrone, S, P, D,.... (maiuscolo) indicano configurazioni con $L = 0, 1, 2, \dots$ rispettivamente.

Similmente per lo spin totale. Ad esempio, per $i=1,2$: $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$

con modulo: $|S| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$ e con il numero quantico: $S = \begin{cases} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \end{cases}$

J, singoletti e tripletti (e quartetti, e...)

L'interazione fra il momento magnetico dello spin (totale) e il campo magnetico interno dato dal momento angolare (totale, **L**) accoppia i due momenti angolari:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad |J| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

I possibili valori di J ? da $L+S$ a $L-S$

$$\text{due elettroni. } S = 0, 1 \rightarrow J = \begin{cases} L, & \text{per } S = 0, \text{ singoletto} \\ L-1, L, L+1, & \text{per } S = 1, \text{ tripletto} \end{cases}$$

$$\text{tre elettroni. } S = 1/2, 3/2 \rightarrow J = \begin{cases} L - \frac{1}{2}, L + \frac{1}{2}, & \text{per } S = \frac{1}{2}, \text{ doppietto} \\ L - \frac{3}{2}, L - \frac{1}{2}, L + \frac{1}{2}, L + \frac{3}{2}, & \text{per } S = \frac{3}{2}, \text{ quartetto} \end{cases}$$

quattro elettroni. $S = 0, 1, 2 \rightarrow$ singoletto, tripletto, quintetto

cinque elettroni. $S = 1/2, 3/2, 5/2 \rightarrow$ doppietto, quartetto, sestetto

...

Nomenclatura: $n \ 2S+1 L_J$

Molteplicità di spin

Momento angolare orbitale

Momento angolare totale

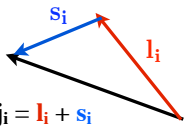
Numero quantico principale
(usualmente dell'elettrone di valenza)

Nota: vanno contati solo gli elettroni che non costituiscono shell o subshell chiuse (per esse $L = 0$)

Accoppiamento j j.

- Accoppiamento jj : ogni l_i di ciascun elettrone si combina con s_i a formare j_i . I momenti angolari così composti di ciascun elettrone si combinano a formare J .

$$V(\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) \gg V(\vec{l}_i \cdot \vec{l}_j), V(\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j)$$



Si ha in atomi pesanti: l'accoppiamento spin-orbita singolo ($l \cdot s$) cresce con Z .

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i \quad |J| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

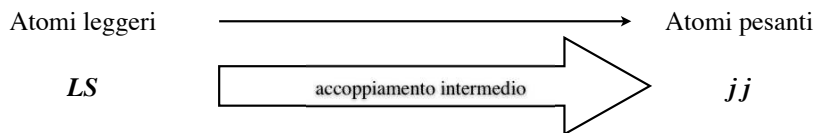
Nota: l'accoppiamento tra l_i e s_i non permette di definire il momento angolare orbitale totale L .

-> la nomenclatura S,P,D,... non è valida.

-> è necessario tener conto di ciascun j_i : notazione (j_1, j_2).

Si dimostra che il numero di possibili stati è il medesimo che si otterrebbe in accoppiamento LS

Accoppiamento intermedio



In accoppiamento intermedio le regole di transizione valide per i due limiti (LS e jj) non sono strettamente rispettate.

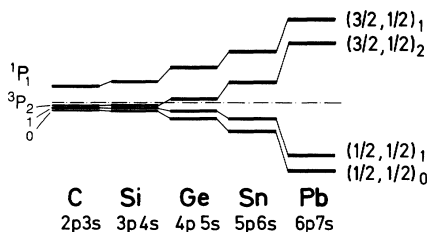


Fig. 17.9. Transition from LS coupling in light atoms to jj coupling in heavy atoms in the series C-Si-Ge-Sn-Pb. In carbon the 3P_0 - 3P_1 and 3P_1 - 3P_2 distance are 20 and 40 cm^{-1} , while the 1P_1 - 3P_2 distance is 1589 cm^{-1} . The term nomenclature is that of LS coupling for carbon, and of jj coupling for lead. The quantum symbols of the two outermost electrons are given. The symbol $(3/2, 1/2)_1$ means $j_1 = 3/2, j_2 = 1/2, J = 1$

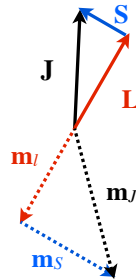
Momento magnetico

Momento magnetico totale: $\mathbf{m}_J = \mathbf{m}_l + \mathbf{m}_s$.

Mentre $\mathbf{m}_l \parallel \mathbf{L}$, e $\mathbf{m}_s \parallel \mathbf{S}$, non si ha necessariamente che \mathbf{m}_J sia \parallel a \mathbf{J} , perché è diverso il rapporto giromagnetico:

$$\mathbf{m}_s = -\frac{e}{m} \mathbf{S} = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$$

$$\mathbf{m}_l = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}$$



Si dimostra che l'unica componente misurabile è quella lungo la direzione di \mathbf{J} . Per essa si ha:

$$|(\mathbf{m}_J)_J| = \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}} \mu_B \equiv g_J \sqrt{J(J+1)} \mu_B$$

che definisce il fattore di Landé anche in questo caso: $g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$

in una direzione i valori di \mathbf{m}_J sono quantizzati, con:

$$(\mathbf{m}_J)_{J,z} = -m_J g_J \mu_B \quad m_J = -J, J-1, \dots, J-1, J$$

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

Tavola periodica

$$H = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{ij} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

Soluzione all'ordine 0: si ignora l'interazione fra gli elettroni
 -> fdo e livelli idrogenoidi, separazione di variabili.

$$\psi = \prod_i \psi_{\{n_i, l_i, m_i\}}^{(i)}$$

Livelli idrogenoidi: n^2 degeneri (in l ed m) $E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{a_0^2} \frac{1}{n^2}$ $n = 1, 2, \dots$
 $0 \leq l \leq n-1$
 $-l \leq m \leq l$

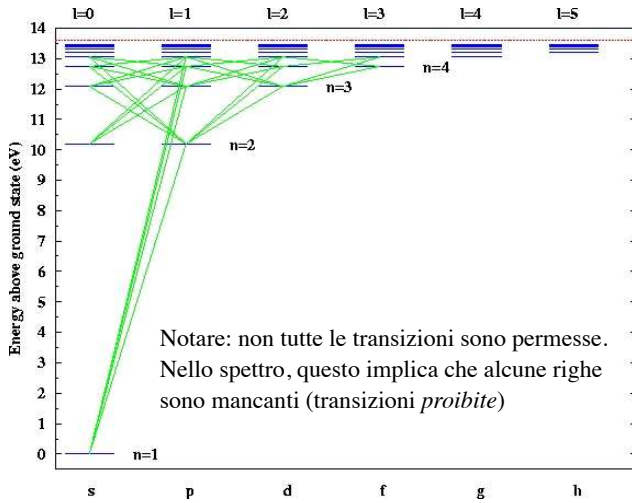
Pauli + antisimmetria:

$H,$	$n = 1, n^2 = 1$: posso accomodare due elettroni,	uno in un singoletto ("spin su e spin giù")
$He,$		i due vanno nel singoletto ($l=0$)
$Li,$	$n = 2, n^2 = 4$: posso accomodare altri otto elettroni:	due vanno nel singoletto ($l=0$)
		uno nel tripletto ($l=1, m=-1, 0, 1$) a $l=0$
$Be,$		due nel singoletto ($l=0$)
		due nel tripletto ($l=1, m=-1, 0, 1$) a $l=0$
$B,$		due nel singoletto ($l=0$)
		due nel tripletto ($l=1, m=-1, 0, 1$) a $l=0$
		uno nel tripletto ($l=1, m=-1, 0, 1$) a $l=1$

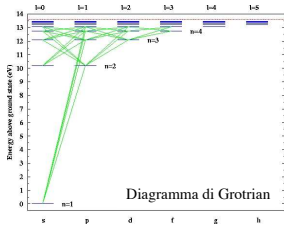
Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

Diagrammi di Grotrian

Diagramma di Grotrian



Righe permesse e proibite



Notare: non tutte le transizioni sono permesse. Nello spettro, questo implica che alcune righe sono mancanti (transizioni *proibite*)

esistono *regole di selezione*, che riflettono vincoli dati dalla fisica.

Ad esempio, poiché:

nelle transizioni viene emesso (o assorbito) un fotone;

un fotone ha un momento angolare (N.B.: onda elettromagnetica polarizzata circolarmente), con $S = 1$;

il momento angolare si conserva;

-> deve essere $\Delta l = \pm 1$

Si ha inoltre $\Delta m = 0, \pm 1$