

## PAR. 2.3 STRUTTURA INTERNA

Costruisco, in prima istanza, un modello classico analogo all' atomo di Bohr <sup>(3)</sup> ( orbitale 1S ) e successivamente passo ad una rappresentazione tipica della meccanica quantistica.

Il modello classico presenta le seguenti caratteristiche :

1) La carica centrale positiva  $q_3^+$  e le cariche negative  $q_{4,2}^-$  sull' orbitale sono prive di massa e di spin.

2) Le cariche sull' orbitale assumono complessivamente il valore :  $-e - e = -2e$

3) La carica centrale assume il valore :  $+e$

4) Il momento angolare intrinseco di spin equilibra, attraverso il potenziale centrifugo esteso <sup>(a)</sup>, l' attrazione coulombiana tra carica centrale e cariche orbitali che risultano sullo stesso asse in posizione contrapposta.

Assumendo, in questo contesto, le cariche come puntuali ed imponendo il valore dello spin dell' elettrone a tutto il sistema :  $|s| = \hbar/2$  , che sostituirò nell' espressione del potenziale centrifugo esteso, ottengo :

$$1.2.3) L_e = \frac{\hbar}{2} = e v r / 2$$

valida per i due elettroni dell' orbitale.

$$\text{Ed essendo : } T_e = e v^2 = \frac{e^2 v^2 r^2}{e r^2} = \frac{4 L_e^2}{e r^2}$$

ricavo il potenziale centrifugo esteso :

$$2.2.3) 4 L_e^2 / e r^2 = \hbar^2 / e r^2$$

scrivo il potenziale efficace esteso :

$$3.2.3) V_{EFF}^e = \underbrace{\frac{\hbar^2}{e r^2}}_A - \underbrace{\frac{2 e^2}{4 \pi \epsilon_0 r}}_B$$

Dove :  $A$  = potenziale centrifugo esteso;  $B$  = termine relativo all' interazione coulombiana tra le cariche dell' orbitale e la carica centrale. In prima approssimazione, non aggiungo il termine d' interazione tra le due cariche dell' orbitale, che considero quindi come bosoni non interagenti ma sottoposti all' azione della carica centrale. Sviluppando la 3.2.3 ottengo:

$$4.2.3) V_{eff}^e = \frac{\hbar^2}{er^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r}$$

derivo la 4.2.3 :

$$5.2.3) \frac{dV_{eff}^e}{dr} = \frac{-2\hbar^2}{er^3} - \frac{-e^2}{2\pi\epsilon_0 r^2}$$

eguaglio a zero la 5.2.3 e scrivo :

$$6.2.3) \frac{\hbar^2}{er^3} = \frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 r^2} \quad \text{da cui :}$$

$$7.2.3) r_e^{\hbar} \equiv R_e \equiv r = 4 \cdot \frac{\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^3} \simeq 3,008705 \cdot 10^{-22}$$

che rappresenta il raggio teorico interno dell' elettrone.

Noto che tra  $R_e$  e  $\lambda_e$  esiste una relazione analoga a quella esistente tra  $R_m$  e  $\lambda_m$  :  $R_m = \lambda_m \cdot d_e$  , infatti:

sostituendo nella 7.2.3 :  $4\pi\epsilon_0 \hbar = e^2/c \cdot d_e$  ottengo :  $R_e = \frac{e^2 \hbar}{e^2 c d_e}$  e considerando che :  $\frac{\hbar}{ec} = \lambda_e$  posso scrivere :

$$8.2.3) R_e = \lambda_e / d_e \quad \text{Il raggio estrapolato sperimentalmente risulta : } r_e^{sp} \simeq 10^{-22}$$

Il modello classico proposto consente di calcolare il raggio teorico interno e di suggerire le caratteristiche salienti della relativa struttura interna. Un' analisi più completa può essere condotta attraverso i metodi usuali della meccanica quantistica. A questo scopo, vista la analogia con l' atomo di Bohr, inizio con lo scrivere l' equazione di Schrodinger per l' orbitale 1S dell' atomo di idrogeno , considerando solo la coordinata radiale e modificando il termine centrifugo non nullo :

$$9.2.3) \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r) = E \psi(r) \quad (6)$$

Dove:  $\frac{\hbar^2}{mr^2} + V(r)$  è il potenziale efficace classico.

Considerando la:  $m = \hbar/\lambda_m \cdot c$  Riscrivo la 9.2.3 esplicitando anche  $V(r)$ :

$$10.2.3) \left[ \frac{-\hbar \cdot \lambda_m \cdot c}{2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar \lambda_m \cdot c}{r^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(r) = E \psi(r)$$

La 10.2.3) ha una versione relativa alle cariche (estesa) che risulta dal sostituire:  $\lambda_m$  con  $\lambda_e$  e ponendo:  $\lambda_e = R_e \cdot d$

$$11.2.3) \left[ -\frac{\hbar R_e \cdot d \cdot c}{2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar R_e \cdot d \cdot c}{r^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(r) = E \psi(r)$$

Considerando che i vari livelli e sottolivelli sia della zona "cariche" che della zona "masse" (vedere PAR. 2.6) sono considerati a geometria sferica, applico ad ogni livello e sottolivello "i" la 11.2.3 che risulta in maniera del tutto generale:

$$12.2.3) \frac{-\hbar R_i \cdot d \cdot c}{2} \frac{d^2 \phi_i}{dr^2} + \left[ \frac{\hbar R_i \cdot d \cdot c}{r^2} - \frac{q_J^2}{2\pi\epsilon_0 r} \right] \phi_i(r) = E_i \phi_i(r) \quad \text{avendo posto per comodità di soluzione: } \phi(r) = r\psi(r)$$

È da notare che nella zona "cariche" si ha:  $R_{q_i} \cdot d = \lambda_{q_i}$  mentre nella zona "masse" si ha:  $R_{m_i} \cdot d = \lambda_{m_i} \cdot d^2$

È possibile ricavare i raggi ai vari livelli e sottolivelli considerando il potenziale efficace come già fatto precedentemente.

A titolo di esempio:

$$A) R_i = R_e \rightarrow \sqrt{e}_{EFF} = \frac{\hbar \lambda_e \cdot c}{r^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \Rightarrow \sqrt{e}_{EFF} = \frac{\hbar^2}{er^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \quad \text{che è la 4.2.3 da cui segue } R_e$$

$$B) R_i = R_m \rightarrow \sqrt{m}_{EFF} = \frac{\hbar \lambda_m \cdot d^2 \cdot c}{r^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \Rightarrow \sqrt{m}_{EFF} = \frac{\hbar^2 d^2}{mr^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \quad \text{Avendo posto: } q_J = e \text{ e derivando:}$$

13.2.3)  $\frac{dV_{eff}}{dr} = \frac{-2\hbar^2 a^2}{m r^3} - \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$  eguaglio a zero e trovo il massimo :

14.2.3)  $\frac{\hbar^2 a^2}{m r^3} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Rightarrow r_{max} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 a^2}{m e^2} \approx \frac{1,112 \cdot 10^{-10} \cdot 1,112 \cdot 10^{-68} \cdot 5,325 \cdot 10^{-5}}{9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 2,566 \cdot 10^{-38}} \approx 2,8171 \cdot 10^{-15} \approx R_m$

Infatti :  $R_m = e^2 / 4\pi\epsilon_0 m e^2 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 a^2 / m e^2 \Rightarrow e^2 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 c^2 = \hbar^2 a^2 / c^2 \Rightarrow e^2 = 4\pi\epsilon_0 \hbar a c$

La autofunzione d'onda radiale dell'orbitale 1S è :

15.2.3)  $\psi_{1s}(r) = 2 \left( \frac{1}{R_m} \right)^{3/2} \cdot e^{-r/R_m}$  assumo che tutti i livelli e sottolivelli abbiano simmetria sferica con funzioni :

16.2.3)  $\psi_i(r) = 2 \left( \frac{1}{R_i} \right)^{3/2} \cdot e^{-r/R_i}$  dove  $R_i$  sono tutti i raggi massimi sia nella zona "cariche" che zona "masse"

Le  $\psi_i(r)$  sono relative al solo orbitale 1S in quanto, per assunzione riguardanti lo spin e il relativo potenziale centrifugo esteso, non esistono i normali numeri quantici presenti nelle trattazioni standard di tipo atomico.

Le complete funzioni d'onda per 1S, considerando anche le componenti angolari sono :

17.2.3)  $\psi_i(P) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{R_i} \right)^{3/2} \cdot e^{-r/R_i}$  per cui :

18.2.3)  $\psi_{tot}^2(P) = \sum \psi_i^2(P) \approx \frac{1}{\pi} \frac{1}{R_m^3} \cdot e^{-2r/R_m}$  essendo :  $R_m = R_{min}$ , inoltre :

19.2.3)  $\psi_{tot}(P) \approx \sqrt{\sum \psi_i^2(P)} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{R_m} \right)^{3/2} \cdot e^{-r/R_m}$

Noto, in ultimo, che esiste una precisa relazione tra raggio dell'atomo di Bohr e il raggio interno dell'elettrone:

20.2.3)  $R_{Bohr} = R_e \cdot Z = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^3} \cdot \frac{e}{m} = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / e^2 m$

Con tale modalità vengono realizzati i "Poincare' stresses" che risultano però diretti in senso contrario a quanto generalmente considerato nel tentativo di determinare la formazione della struttura dell' elettrone. (4)

Le grandezze : massa , energia intrinseca e lunghezza d' onda , relative ad un livello o sottolivello possono anche considerarsi distribuite su quest' ultimo , considerandone le varie densità .

La lunghezza d' onda , relativa ad un certo livello , pur assumendo il valore calcolato normalmente :  $\lambda_i = \frac{hc}{E_i}$  può anche considerarsi come grandezza composta . Nella "zona masse" :  $\lambda_{m_i} = n \cdot \lambda_{m_i}^0$  con :  $n \gg 2\pi/\alpha$  per cui :  $\lambda_{m_i}^0 \ll R_{m_i}$

● ) Negli orbitali atomici di tipo S , esiste una correlazione tra raggio e lunghezza d' onda di de Broglie associata :

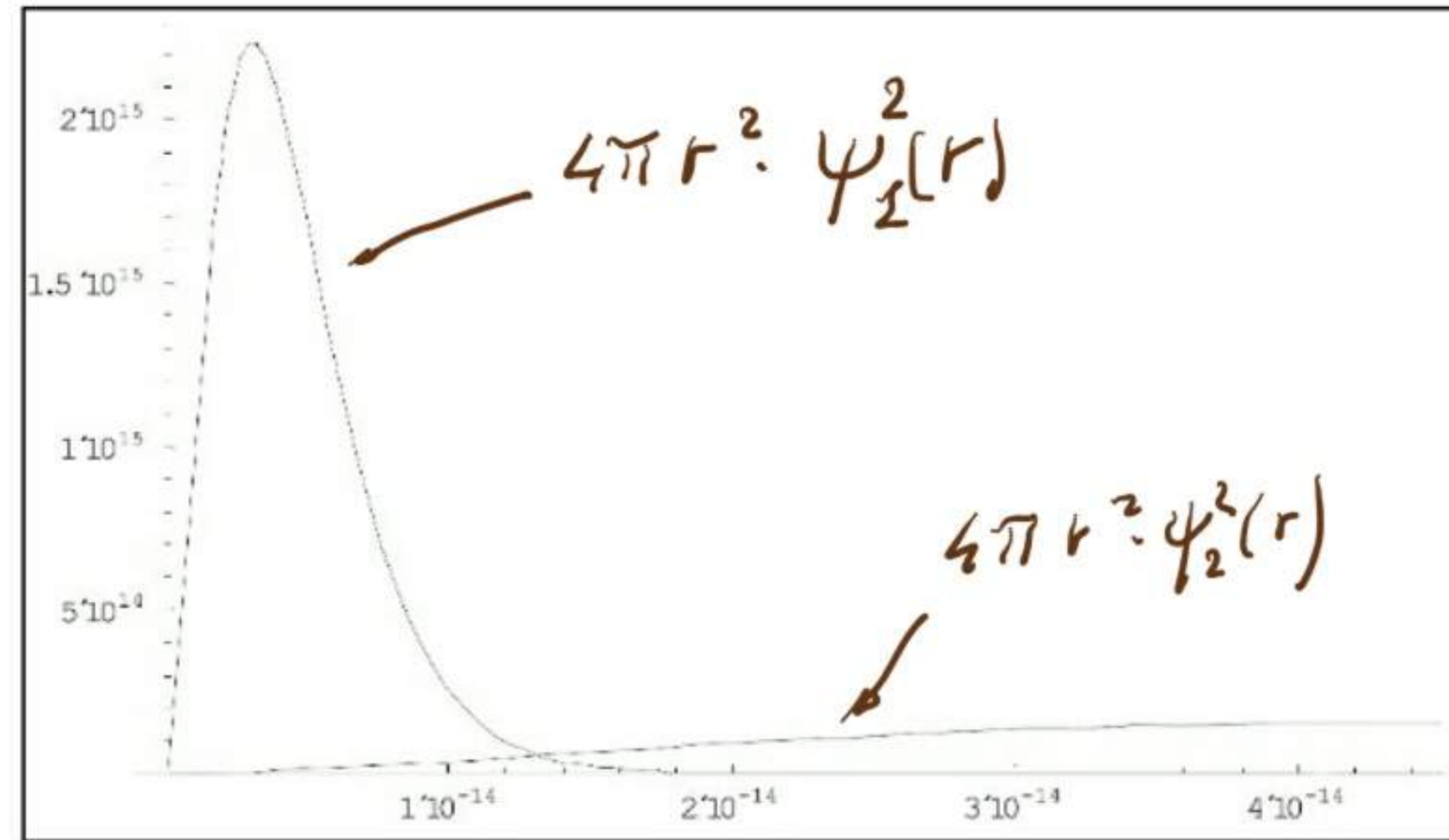
21.2.3)  $2\pi R_a = n_a \lambda_a$  l' onda è considerata polarizzata trasversalmente .  $n_a$  intero garantisce la stazionaria dell' orbitale considerato .

Nei livelli e sottolivelli dell' elettrone esiste una correlazione simile tra raggio e lunghezza d' onda di de Broglie associata :

22.2.3)  $2\pi R_i = \alpha^{n_i} \lambda_i$  l' onda è considerata polarizzata longitudinalmente. (Vedere PAR. 2.6) .  $n_i = \mp 1$  dipende se si considera la zona "cariche" o "masse" . La stazionarietà del livello o sottolivello considerato dipende dalla espressione del potenziale efficace relativo ad esso come precedentemente mostrato . La "sovrapposibilità" circonferenziale , necessaria nel caso atomico in virtù della componibilità esatta di onde trasversali , non è più necessaria , nel caso dell' elettrone, per onde longitudinali il cui metodo di composizione è lungo il rispettivo asse e non lungo la circonferenza data.

Alcuni esempi di sviluppo radiale di livelli e sottolivelli

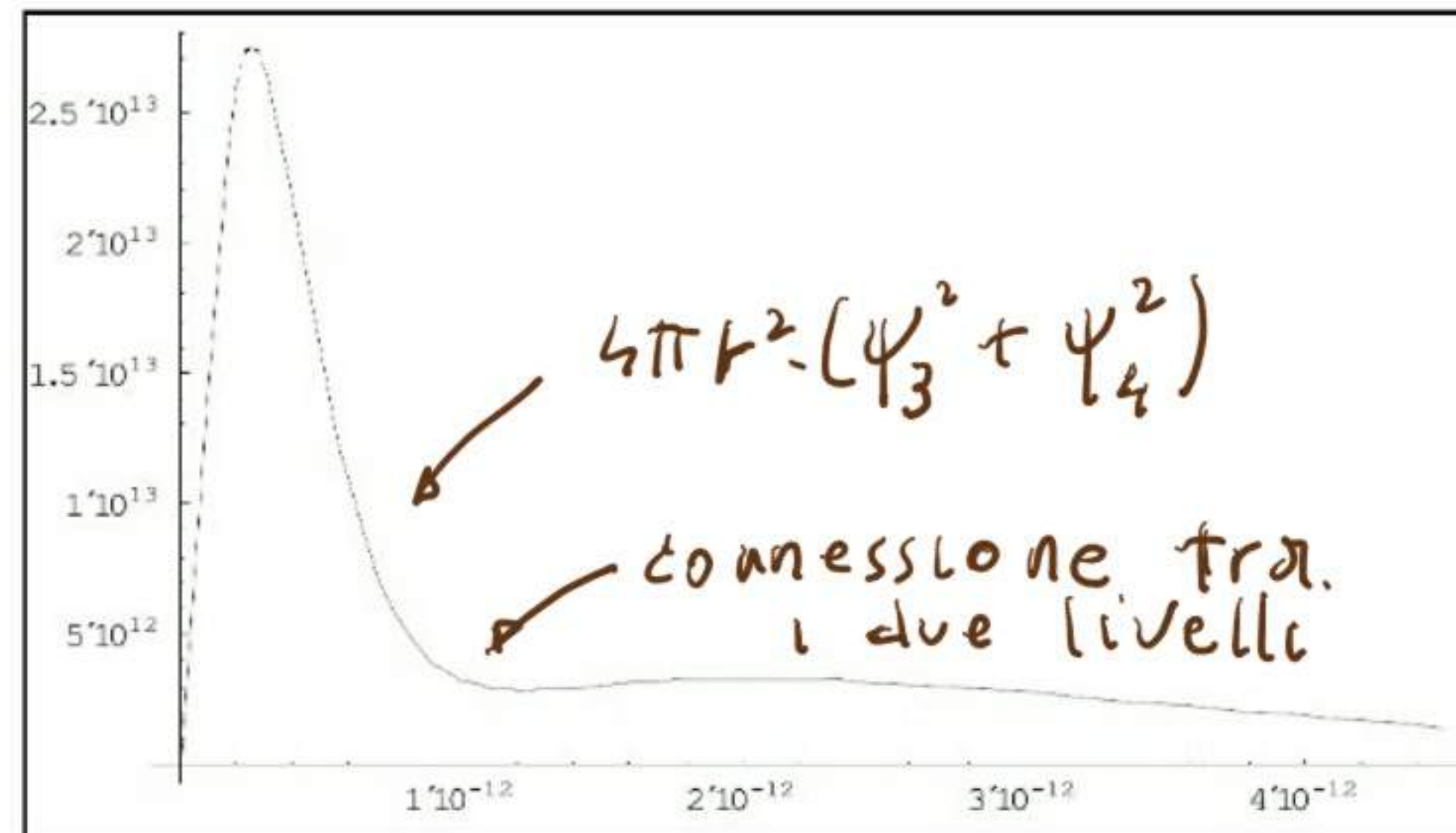
Livello 1 e livello 2  
separati



$$\psi_1(r) = \frac{2}{R_1^{3/2}} \cdot e^{-r/R_1}; \quad R_1 = \frac{a}{c^2 \cdot \frac{a^2}{2}}$$

$$\psi_2(r) = \frac{2}{R_2^{3/2}} \cdot e^{-r/R_2}; \quad R_2 = \frac{a}{c^2 \cdot \frac{a^{2.5}}{2.5}}$$

Livello 3.2 e sottolivello  
3.3 uniti



$$\psi_3(r) = \frac{2}{R_3^{3/2}} \cdot e^{-r/R_3}; \quad R_3 = \frac{a}{c^2 \cdot \frac{a^3}{2}}$$

$$\psi_4(r) = \frac{2}{R_4^{3/2}} \cdot e^{-r/R_4}; \quad R_4 = \frac{a}{c^2 \cdot \frac{a^3}{3}}$$

disegni non in scala