



# **Lezione 2**

## **Cenni di meccanica quantistica**

### **Fisica dei Semiconduttori**

## Operatori in meccanica quantistica

Equazione di Schroedinger: 
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \phi = \varepsilon \phi$$

In termini matematici diciamo che l'espressione  $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z)$

è un operatore che, quando agisce sulla funzione  $\phi(x,y,z)$ , produce una nuova funzione come risultato di una serie di operazioni esplicitamente contenute nella definizione di  $\mathbf{H}$ . In particolare, possiamo riscrivere l'equazione di Schrödinger come:

$$H\phi(x, y, z) = \varepsilon\phi(x, y, z) \quad (*)$$

Cioè l'effetto di  $\mathbf{H}$  su  $\phi(x,y,z)$  è quello di moltiplicare  $\phi(x,y,z)$  per  $\varepsilon$ . Ovviamente, in generale, quando  $\mathbf{H}$  opera su una funzione arbitraria il risultato non è necessariamente la stessa  $\phi(x,y,z)$  moltiplicata per una costante. Le funzioni che soddisfano la (\*) sono chiamate **autofunzioni dell'operatore  $\mathbf{H}$**  ed i valori  $\varepsilon$  corrispondenti **autovalori dell'operatore**.

## Operatori quantistici e grandezze fisiche

1. Ad ogni grandezza fisica  $\mathbf{A}(\underline{r}, \underline{p})$ , che è funzione della posizione e del momento di una particella, corrisponde un operatore quantistico ottenuto effettuando la sostituzione:

$$\underline{p} \rightarrow -i\hbar \underline{\nabla}$$

2. I soli valori possibili che possono essere ottenuti quando si misura la grandezza fisica  $\mathbf{A}(\underline{r}, \underline{p})$  sono gli autovalori dell'operatore quantistico :  $A(\underline{r}, -i\hbar \underline{\nabla})$

Nella tabella sotto sono riportati gli operatori quantistici di alcune grandezze fisiche.

Grandezza fisica	Definizione classica	Operatore Quantistico
Posizione	$\underline{r}$	$\underline{r}$
Momento	$\underline{p}$	$-i\hbar \underline{\nabla}$
Momento angolare	$\underline{r} \times \underline{p}$	$-i\hbar \underline{r} \times \underline{\nabla}$
Energia cinetica	$\frac{p^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
Energia totale	$\frac{p^2}{2m} + U_P$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_p$

# Esempi di calcolo dell'equazione di Schroedinger

## 1. Particella libera

In questo caso  $U = U(x) = 0$ , l'equazione diviene:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(x, y, z) = E \phi(x, y, z)$

in una dimensione:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = E \phi$

Per una particella libera vale:  $E = \frac{p^2}{2m}$  e:  $p = \hbar k$

Quindi:  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  e l'equazione diviene:  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + k^2 \phi = 0$

equazione di un'onda stazionaria di lunghezza d'onda :  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$

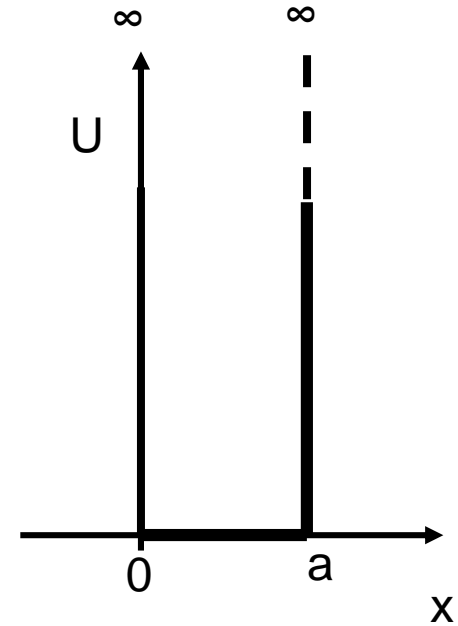
L'equazione ammette soluzioni del tipo:  $\phi_+(x) = e^{ikx}$ ;  $\phi_-(x) = e^{-ikx}$

$\Phi_+$  rappresenta una particella che si muove in verso positivo rispetto all'orientamento dell'asse  $x$ , per  $\Phi_-$  la direzione è opposta. La soluzione generale può essere scritta come combinazione lineare delle due soluzioni:

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

## 2. Particella in buca di potenziale

Pensiamo ad un potenziale rettangolare del tipo di figura (buca di potenziale). Avremo  $U(x) = 0$  per  $0 < x < a$  e  $U(x) \rightarrow \infty$  per  $x > a$  e  $x < 0$ . Questo significa che esistono delle forze molto elevate che costringono la particella a rimanere entro la buca di potenziale, quindi  $\phi(x) = 0$  per  $x \geq a$  e  $x \leq 0$ . All'interno della buca la particella si muove liberamente dato che qui  $E_p(x) = 0$ , quindi in questa regione il problema si riconduce al caso discusso precedentemente:



$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + k^2 \phi = 0 \quad \text{con:} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad \phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Le condizioni al contorno impongono che:

$$\phi(0) = A + B = 0 \rightarrow A = -B \rightarrow \phi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx;$$

$$\phi(x=a) = 2iA \sin(ka) = 0 \rightarrow k = n \frac{\pi}{a} \rightarrow p = \hbar k = \frac{\pi \hbar}{a} n.$$

Quest'ultima espressione indica i valori permessi di momento. Corrispondentemente, i valori permessi di energia sono dati da:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

## I livelli energetici permessi per la particella in buca di potenziale sono:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{con } n= 1, 2, 3, \dots$$

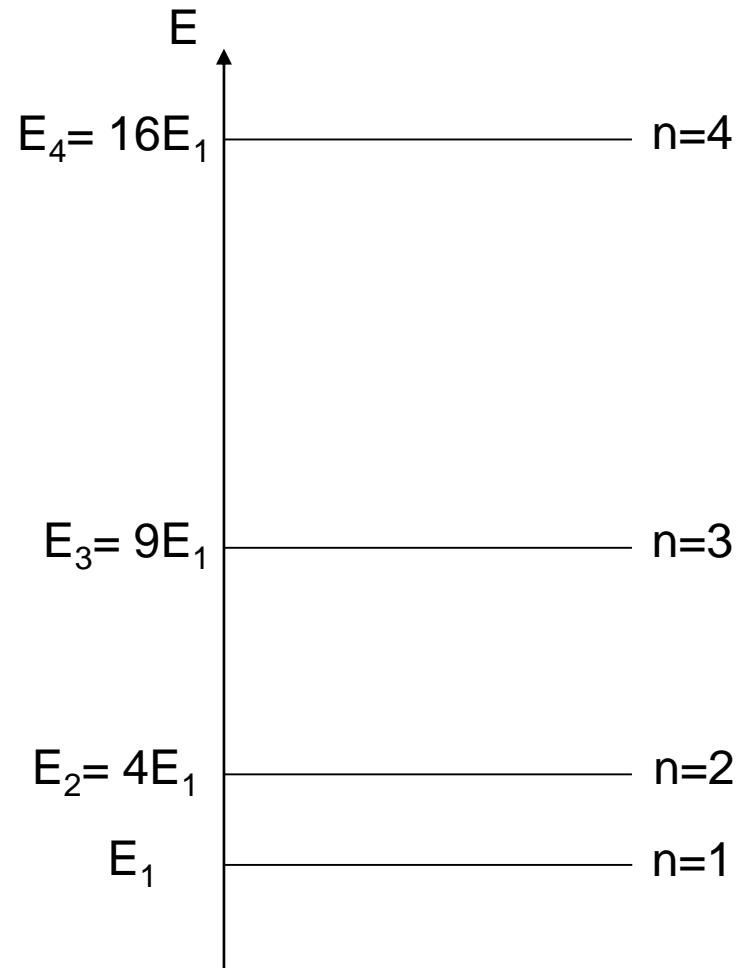
L'energia non può assumere un valore arbitrario, risulta quantizzata. Questa situazione avviene in generale quando l'equazione di Schroedinger viene risolta per un potenziale che confina la particella in una regione limitata dello spazio.

Notiamo che l'energia minima della particella non è zero, ma pari a:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{h^2}{8ma^2}$$

Questo deriva dal principio di indeterminazione di Heisenberg. L'indeterminazione sulla posizione

sia  $\Delta x \sim a$ , la particella si muove avanti e indietro con momento  $p$ , per cui  $\Delta p \sim 2p$ ,  
 $\Delta x \Delta p \geq h \rightarrow 2ap \geq h \rightarrow E \geq E_1$ .

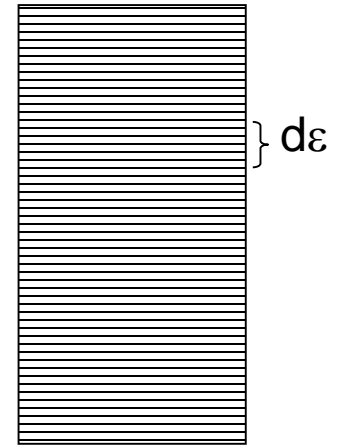
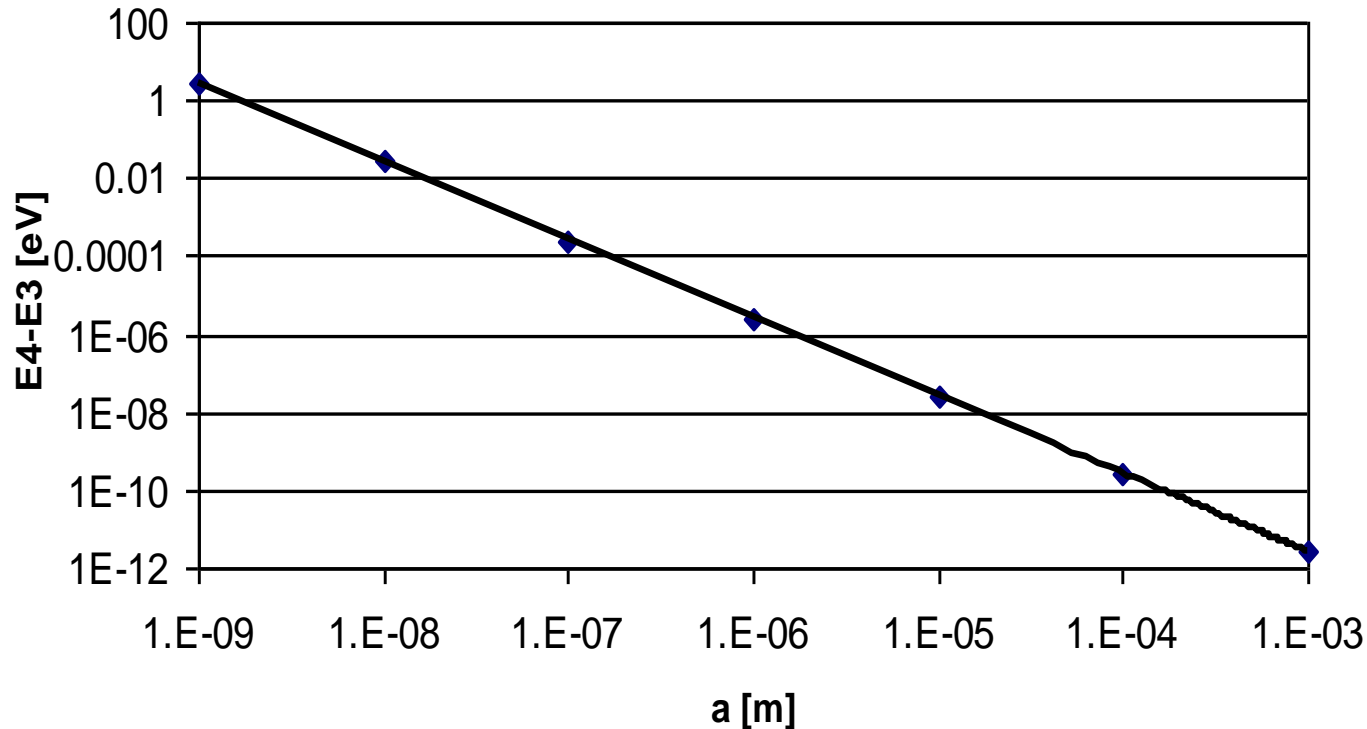


## OSSERVAZIONE

I livelli energetici della particella libera nella buca dipendono dalla larghezza della buca:

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Immaginiamo un elettrone di conduzione come particella libera dentro un campione di lato  $a$ . La distanza tra livelli adiacenti nel caso di scala nanometrica risulta di 10-100meV, quindi i livelli sono da ritenersi **discreti**, su scala macroscopica invece ( 1mm ) la distanza è tale che i livelli hanno **distribuzione praticamente continua**



Livelli energetici di una particella libera confinata in un cubo di lato  $a$  di dimensioni macroscopiche

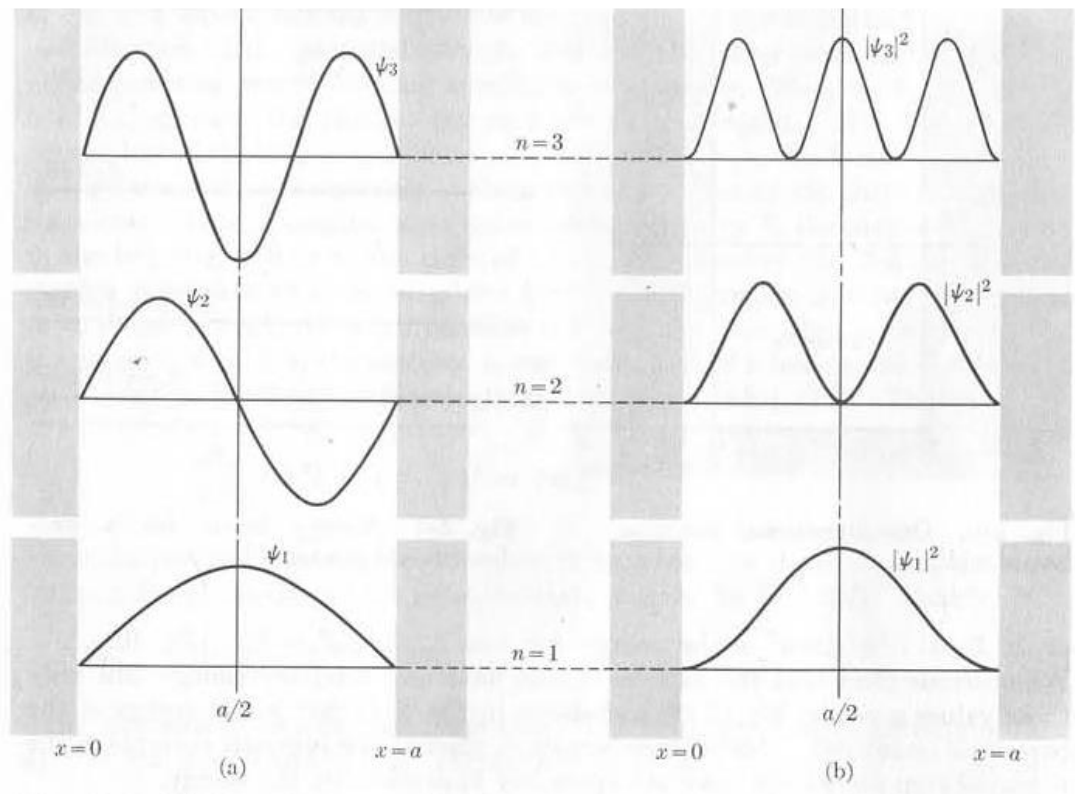
I valori di  $k$  permessi per la particella in buca di potenziale sono:  $k = n \frac{\pi}{a}$ .

Le funzioni d'onda che corrispondono ai valori di  $k$  permessi sono:  $\phi_n(x) = C \sin\left(n \frac{\pi x}{a}\right)$ .

con  $C = 2iA$ , che infatti corrispondono a onde stazionarie che vibrano con estremità fisse, per le quali vale:

$$\frac{1}{2} \lambda = a; \frac{1}{2} a; \frac{1}{3} a; \dots \frac{1}{n} a.$$

**Le prime tre funzioni d'onda per una particella in buca di potenziale e le corrispondenti densità di probabilità sono mostrate nella figura a fianco**





Completiamo la discussione determinando la costante  $C$  utilizzando la condizione di normalizzazione:

$$\int_0^a |\phi(x)|^2 dx = 1 \rightarrow C^2 \int_0^a \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

Il valore dell'integrale è :  $\int_0^a \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2} a$

Perciò otteniamo:  $C^2 \frac{1}{2} a = 1 \rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}$ .

le autofunzioni normalizzate sono perciò:  $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ .

## Osservazione: Equazione di Schrödinger in tre dimensioni

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \phi = \varepsilon \phi$$

per **U indipendente dal tempo**. Se :  $U(x,y,z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$

le soluzioni sono del tipo:  $\phi(x,y,z) = \phi_1(x) \phi_2(y) \phi_3(z)$  . Abbiamo:

$$\frac{1}{\phi_1(x)} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_1(x) \right) \phi_1(x) + \frac{1}{\phi_2(y)} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U_2(y) \right) \phi_2(y) + \frac{1}{\phi_3(z)} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_3(z) \right) \phi_3(z) = \varepsilon$$

Ogni termine del primo membro è funzione di una sola coordinata, x, y, o z, mentre nel secondo membro abbiamo il termine indipendente  $\varepsilon$ .

Il solo modo per soddisfare questa equazione è che ciascuno dei tre termini del primo membro sia uguale ad una costante  $\varepsilon_i$  (  $i = 1,2,3$ ) tale che:  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \varepsilon$ .

Come risultato otteniamo tre equazioni monodimensionali, molto più semplici da risolvere.

→

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_1(x) \right) \phi_1(x) = E_1 \phi_1(x)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + U_2(y) \right) \phi_2(y) = E_2 \phi_2(y)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U_3(z) \right) \phi_3(z) = E_3 \phi_3(z)$$

Se poi  $U(x,y,z) = U_1(x)$  il sistema si riduce ad una sola equazione monodimensionale in  $x$ . Le soluzioni per la funzione d'onda e le energie per le altre due dimensioni  $y$  e  $z$  sono quelle della particella libera:

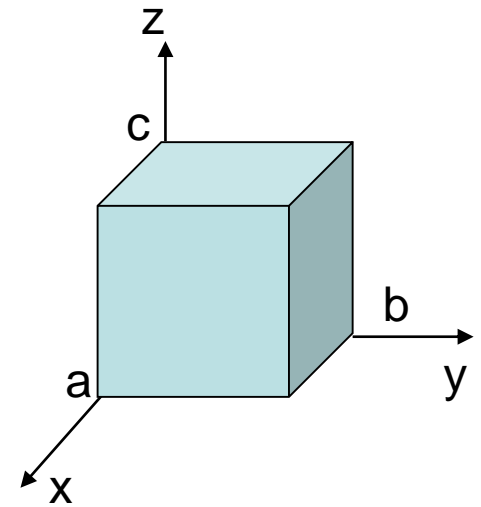
$$\phi(x, y, z) = \phi_1(x) A_y A_z e^{iky} e^{ikz} \quad ; \quad E = E_1 + \frac{\hbar^2(k_y^2 + k_z^2)}{2m}$$

Dove  $A_y$  ed  $A_z$  sono le costanti di normalizzazione per le soluzioni dell'onda piana nelle direzioni  $y$  e  $z$ .

### 3. Particella in buca di potenziale tridimensionale

Consideriamo ora un particella confinata in una regione tridimensionale di dimensioni  $a$ ,  $b$ ,  $c$  come in figura. Estendendo il ragionamento del caso precedente, otteniamo:

$$p_x = \frac{\pi \hbar n_1}{a} \quad p_y = \frac{\pi \hbar n_2}{b} \quad p_z = \frac{\pi \hbar n_3}{c}$$



$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \quad \phi(x, y, z) = C \operatorname{sen} \left( \frac{n_1 \pi x}{a} \right) \operatorname{sen} \left( \frac{n_2 \pi y}{b} \right) \operatorname{sen} \left( \frac{n_3 \pi z}{c} \right).$$

con  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  interi. Notiamo che l'energia dipende solo dalla somma  $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ , perciò tutti gli stati che hanno stesso valore per questa somma hanno stessa energia ma diversa funzione d'onda. Quando questo succede diciamo che abbiamo **degenerazione dei livelli energetici corrispondenti**. L'ordine di degenerazione di un livello energetico, designato con  $g$ , è uguale al **numero di diverse e indipendenti funzioni d'onda soluzione dell'equazione di Schroedinger per quella energia**.

## 4. Atomo di idrogeno / atomi ad un solo elettrone

Nel caso dell'elettrone legato al nucleo nell'atomo di idrogeno l'energia potenziale è:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

quindi l'equazione di Schroedinger diviene\*:

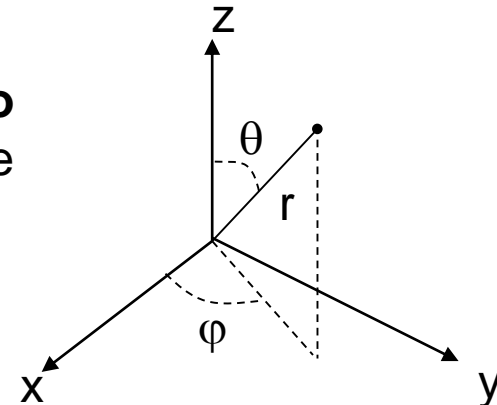
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \phi = E \phi$$

\* Con  $m$  massa ridotta del sistema

La soluzione di questa equazione è al di là degli scopi di questo corso. Daremo qui solo alcune indicazioni sul risultato di tale calcolo.

**Data la simmetria sferica dell'energia potenziale atomico** l'equazione di Schroedinger si scrive utilizzando le coordinate sferiche  $(r, \theta, \varphi)$  e le soluzioni hanno la forma:

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = \underbrace{\phi_{n,l}(r)}_{\text{Fattore radiale}} \underbrace{\phi_{l,m_l}(\theta, \varphi)}_{\text{Fattore angolare}}$$



Effettuando la risoluzione si verifica che il fattore radiale risulta dipendere da due numeri quantici denominati  $n$  ed  $l$ , mentre il fattore angolare dipende sia dal numero quantico  $l$  che da un ulteriore numero quantico  $m$ .

## a. $n =$ numero quantico principale, quantizzazione dell'energia

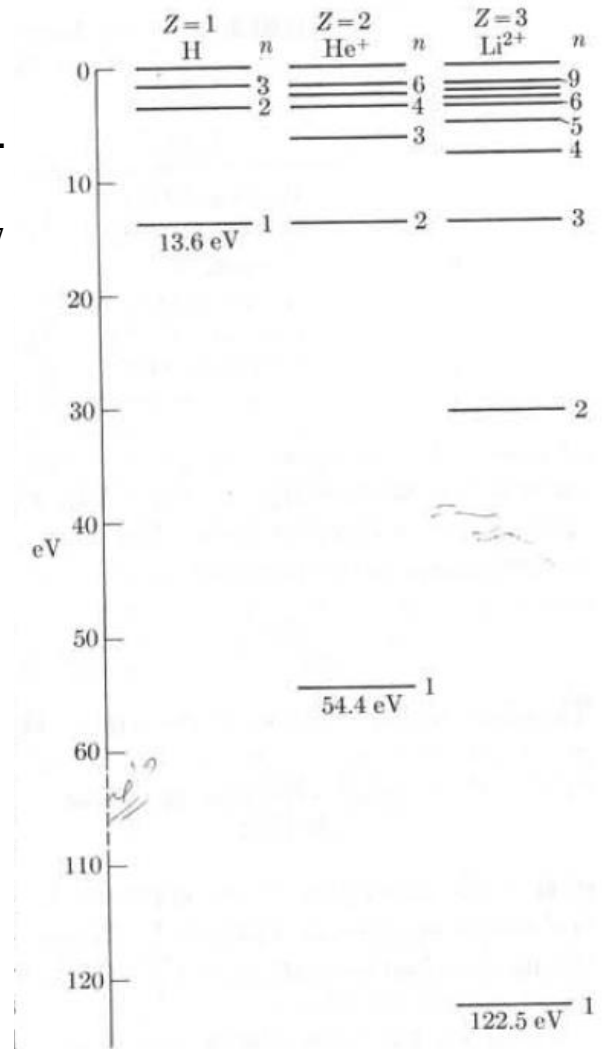
I livelli energetici possibili per gli stati stazionari dell'elettrone dell'atomo di idrogeno sono dati dall'espressione:

$$E_n = -\frac{R_\infty}{n^2} hc = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{Con: } n = 1, 2, 3, \dots$$

$$R_\infty \text{ costante di Rydberg : } R_\infty = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} = 1.0974 \times 10^7$$

Per un atomo con un unico elettrone legato ad un nucleo con  $Z$  protoni:

$$E_n = -\frac{R hc Z^2}{n^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV.}$$



## b. l, m<sub>l</sub> - quantizzazione del momento angolare $\underline{L}$ e della sua componente assiale

### 1. Quantizzazione del modulo di $\underline{L}$

Nel caso della particella nella buca di potenziale abbiamo visto che **energia e momento, costanti del moto, sono entrambe quantizzate. In un moto dovuto ad un campo di forza centrale non solo l'energia, ma anche il momento angolare è costante del moto**: da un'analisi sia teorica che sperimentale si mostra che **anche il momento angolare risulta quantizzato**.

La quantizzazione sul modulo del momento angolare  $\underline{L}$  si esprime con la relazione:

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad \text{con } l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

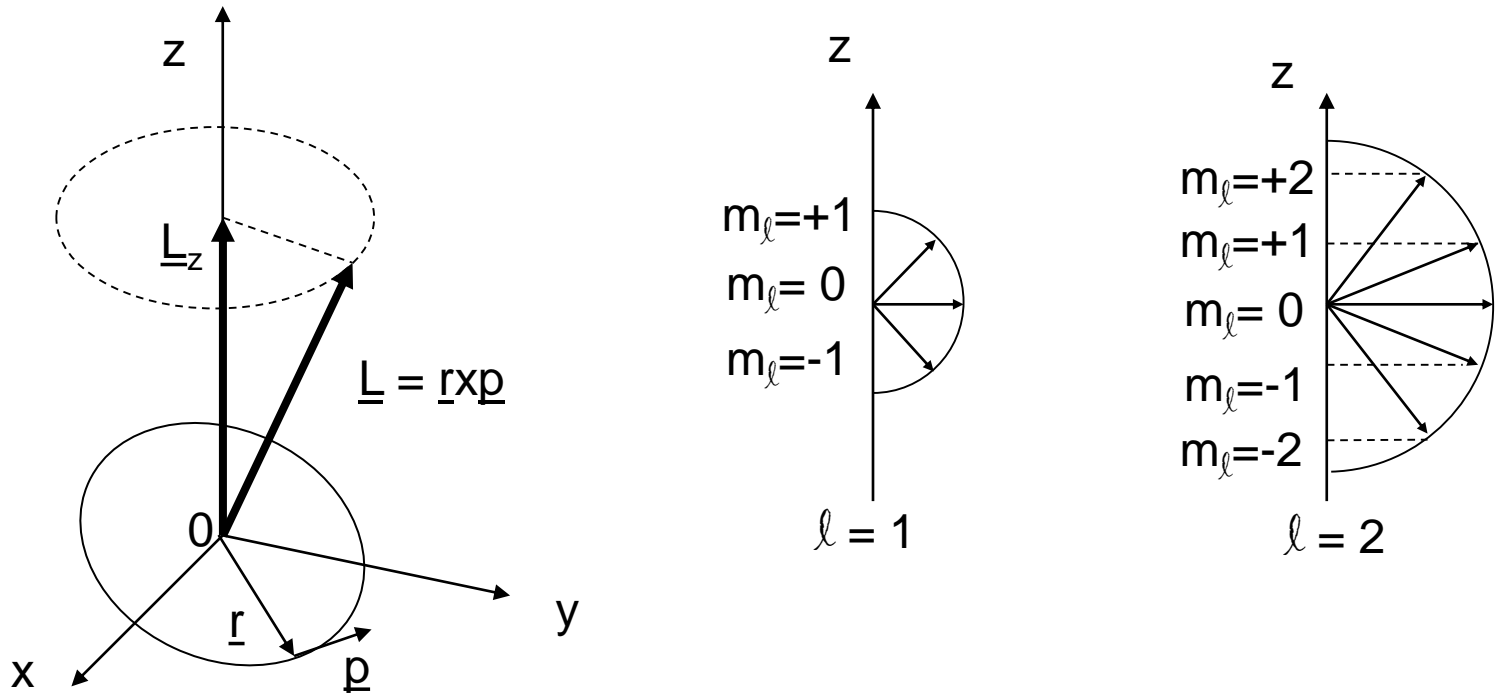
Quindi: in un campo Coulombiano **per ogni valore di n ci sono n valori distinti possibili per il momento angolare, da  $l = 0$  a  $l = n-1$** . I diversi valori di  $l$  sono solitamente designati con lettere s ( $l=0$ ), p ( $l=1$ ), d ( $l=2$ ), f ( $l=3$ ) e così via.  $l$  è detto **numero quantico azimutale**.

### 2. Quantizzazione della componente assiale di $\underline{L}$

Oltre alla limitazione sul modulo **si mostra sperimentalmente (effetto Zeeman)** che esiste una restrizione **nella direzione del momento angolare** (quantizzazione spaziale): i valori della componente z del momento angolare  $L_z$ , risultano infatti quantizzati secondo la relazione:

$$L_z = m_l \hbar \quad \text{con } m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

Ovviamente il numero quantico  $m_\ell$  non può essere superiore ad  $\ell$ .  $m_\ell$  si dice **numero quantico magnetico**.



Quindi per ciascun valore del momento angolare, ci sono  $2\ell+1$  valori di  $m_\ell$ .

La quantità  $g = 2\ell+1$  è detta **degenerazione essenziale** di ogni stato con un determinato momento angolare. Osserviamo che, se la forza in gioco non è funzione dell'inverso del quadrato della distanza, **quei livelli che hanno lo stesso valore di  $n$  ma diverso valore di  $\ell$  non hanno necessariamente la stessa energia. Se però la forza è comunque centrale, l'energia non dipende da  $m_\ell$  perché l'orientazione dell'orbita è irrilevante.**



## c. Quantizzazione di Spin

Sappiamo che la Terra, contemporaneamente al moto di rivoluzione intorno al sole, compie un moto rotatorio intorno al suo asse ( in inglese = *to spin*): il suo momento angolare totale è somma vettoriale del momento angolare di rivoluzione e di quello di rotazione. In analogia con questa evidenza **possiamo immaginare che l'elettrone legato all'atomo oltre al moto orbitale “ ruoti su se stesso” e quindi possieda momento angolare di spin. Se  $\underline{S}$  è il momento angolare di Spin ed  $\underline{L}$  quello orbitale, il momento angolare totale dell'elettrone sarà  $\underline{J} = \underline{S} + \underline{L}$ .**

n.b.: E' ovvio che, non avendo l'elettrone struttura interna, **non ha senso considerarlo come particella sferica che ruota su se stessa**, tale raffigurazione è comunque un modello valido per la descrizione di alcuni importanti fenomeni sperimentali.

**Dato che l'elettrone è una particella carica lo spin elettronico produrrà un momento di dipolo magnetico  $\underline{M}_S$ .** Nel semplice modello di un corpo rigido sferico ruotante su se stesso, la relazione tra  $M_S$  ed  $S$  sarà la stessa che abbiamo trovato tra  $\underline{M}_L$  ed  $\underline{L}$ . In realtà quello che si ha è un po' diverso:

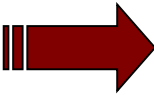
$g_S$  è detto **rappporto giromagnetico** dell'elettrone, di valore sperimentale  $g_S = 2.0024$ . Il momento di dipolo magnetico di un elettrone che orbita e ruota è quindi:

$$\underline{M}_S = -g_S \frac{e}{2m_e} \underline{S}$$

$$\underline{M} = \underline{M}_L + \underline{M}_S = -\frac{e}{2m_e} (\underline{L} + g_S \underline{S})$$

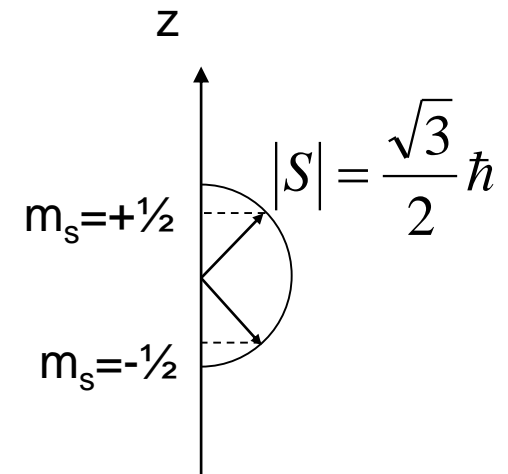
Ricordando che la degenerazione effettiva del momento angolare è  $g = 2\ell + 1$ , poiché nel caso dello spin  $g = 2$  dobbiamo avere  $\ell = \frac{1}{2}$ . Indicando il numero quantico di spin come  $s$  invece che come  $\ell$  ed il numero quantistico corrispondente alla componente z,  $S_z$ , come  $m_s$  invece che  $m_\ell$  avremo:

$$s = \frac{1}{2};$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$


$$S^2 = s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

$$S_z = m_s\hbar$$



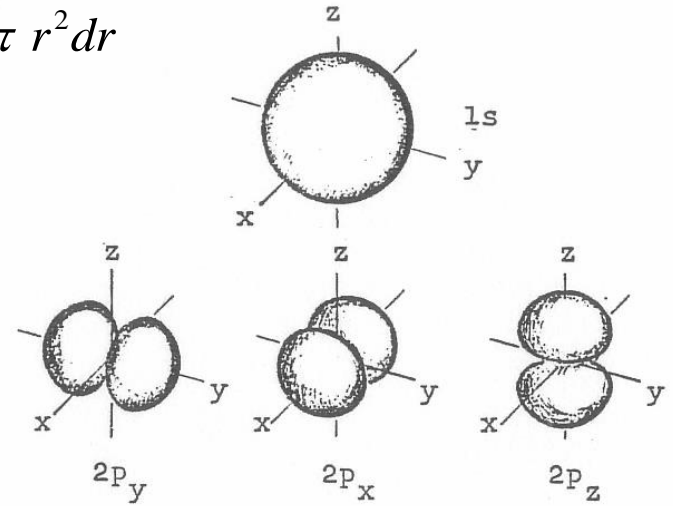
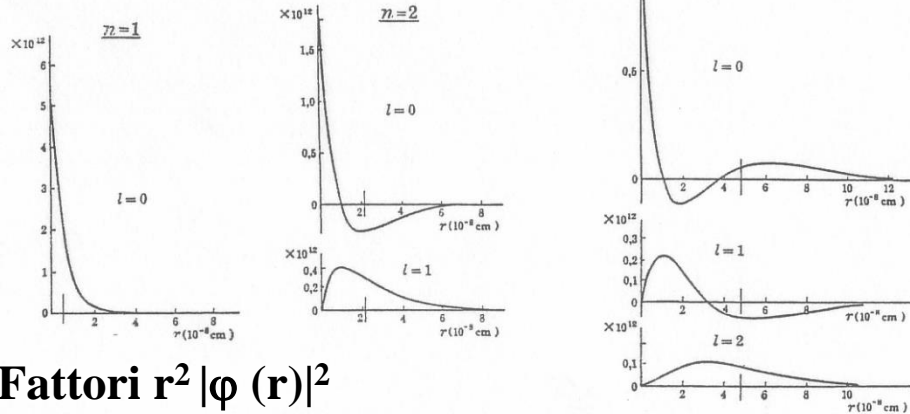
Concludiamo quindi che per descrivere completamente lo stato di un elettrone in un campo centrale sono necessari quattro numeri quantici:  $n, \ell, m_\ell, m_s$ .

# fattori radiali e conformazione radiale di orbitali atomici

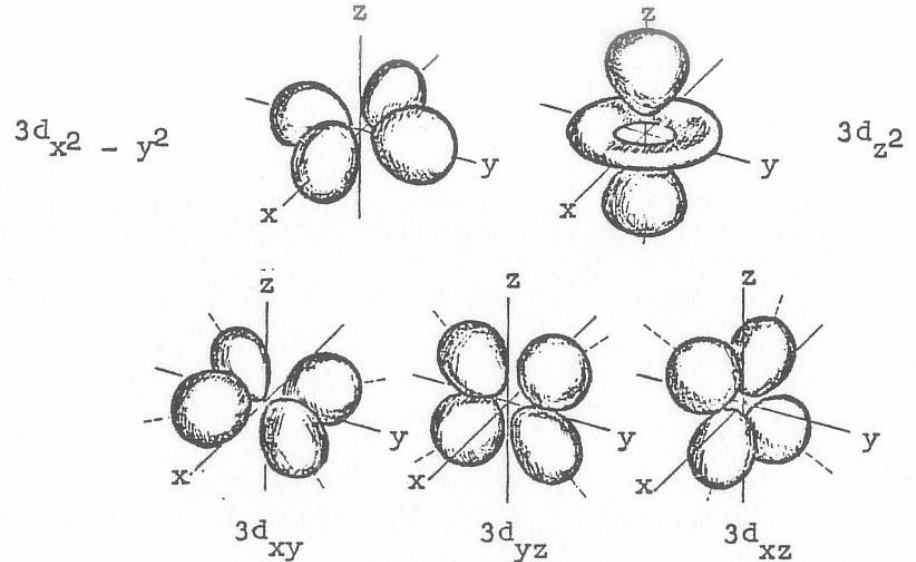
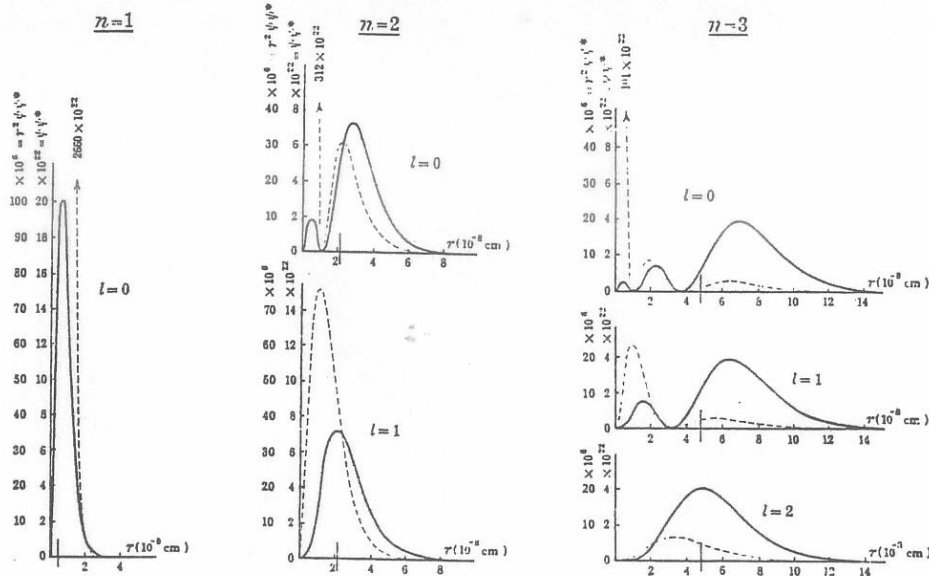
La probabilità che l'elettrone si trovi nella regione di spazio tra  $r$  ed  $r + dr$  è data da:

$$dP = |\Phi|^2 dV = |\Phi|^2 4\pi r^2 dr$$

## Fattori radiali $\varphi(r)$



## Fattori $r^2 |\varphi(r)|^2$



# Orbitali atomici – Fattori radiali e angolari

Fattori radiali

$$\psi(1s) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \sigma) e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2) e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (4 - \sigma) \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$$

$$\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$$

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

Fattori angolari

$$\psi(s) = \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

$$\psi(p_x) = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin\vartheta \cos\varphi$$

$$\psi(p_y) = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin\vartheta \sin\varphi$$

$$\psi(p_z) = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos\vartheta$$

$$\psi(d_{z^2}) = \left( \frac{5}{16\pi} \right)^{1/2} (3 \cos^2\vartheta - 1)$$

$$\psi(d_{xz}) = \left( \frac{15}{4\pi} \right)^{1/2} \sin\vartheta \cos\vartheta \cos\varphi$$

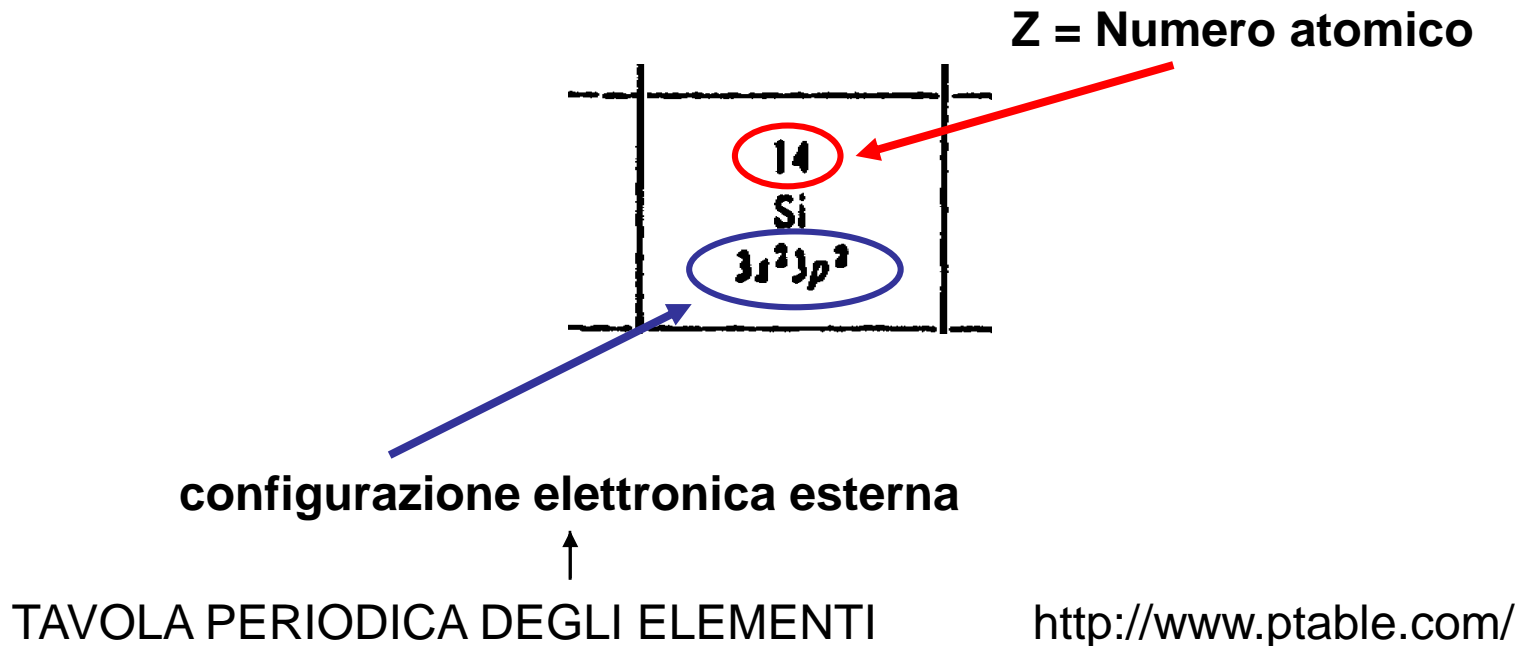
$$\psi(d_{yz}) = \left( \frac{15}{4\pi} \right)^{1/2} \sin\vartheta \cos\vartheta \sin\varphi$$

$$\psi(d_{x^2-y^2}) = \left( \frac{15}{4\pi} \right)^{1/2} \sin^2\vartheta \cos 2\varphi$$

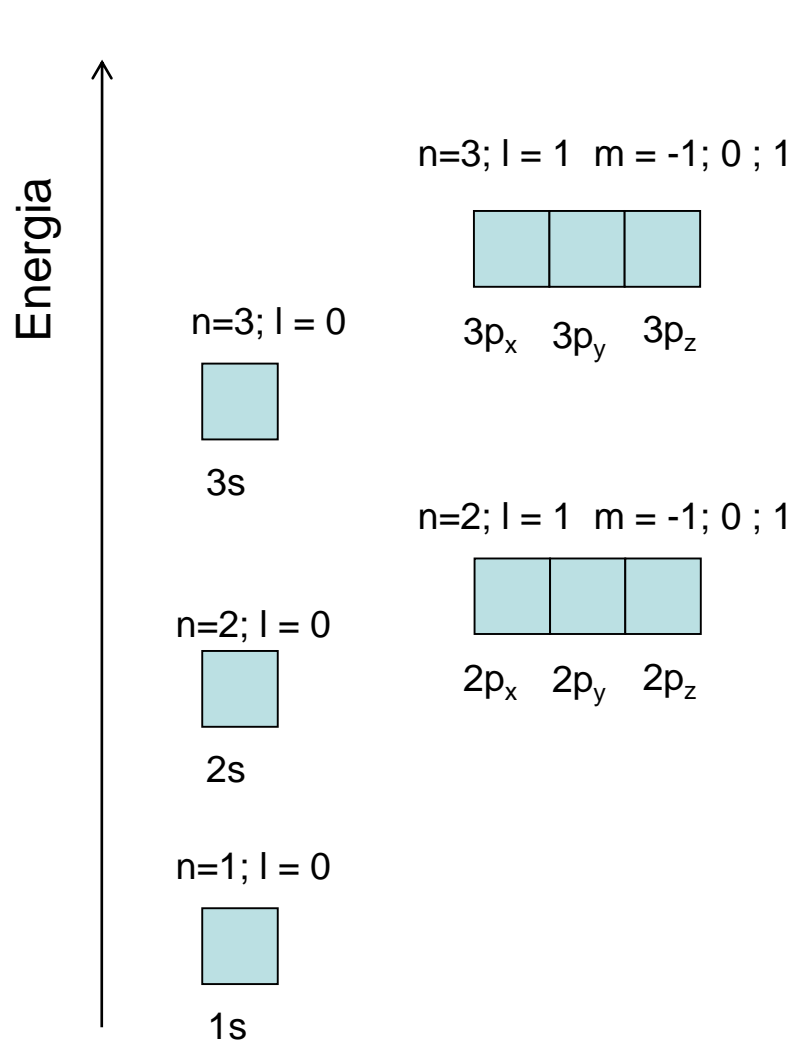
$$\psi(d_{xy}) = \left( \frac{15}{4\pi} \right)^{1/2} \sin^2\vartheta \sin 2\varphi$$

# Configurazione elettronica esterna

**Configurazione elettronica** Struttura elettronica di un atomo od una molecola. Corrisponde al modo di distribuirsi degli elettroni negli orbitali dell'atomo o della molecola. E' particolarmente importante quella della shell più esterna.

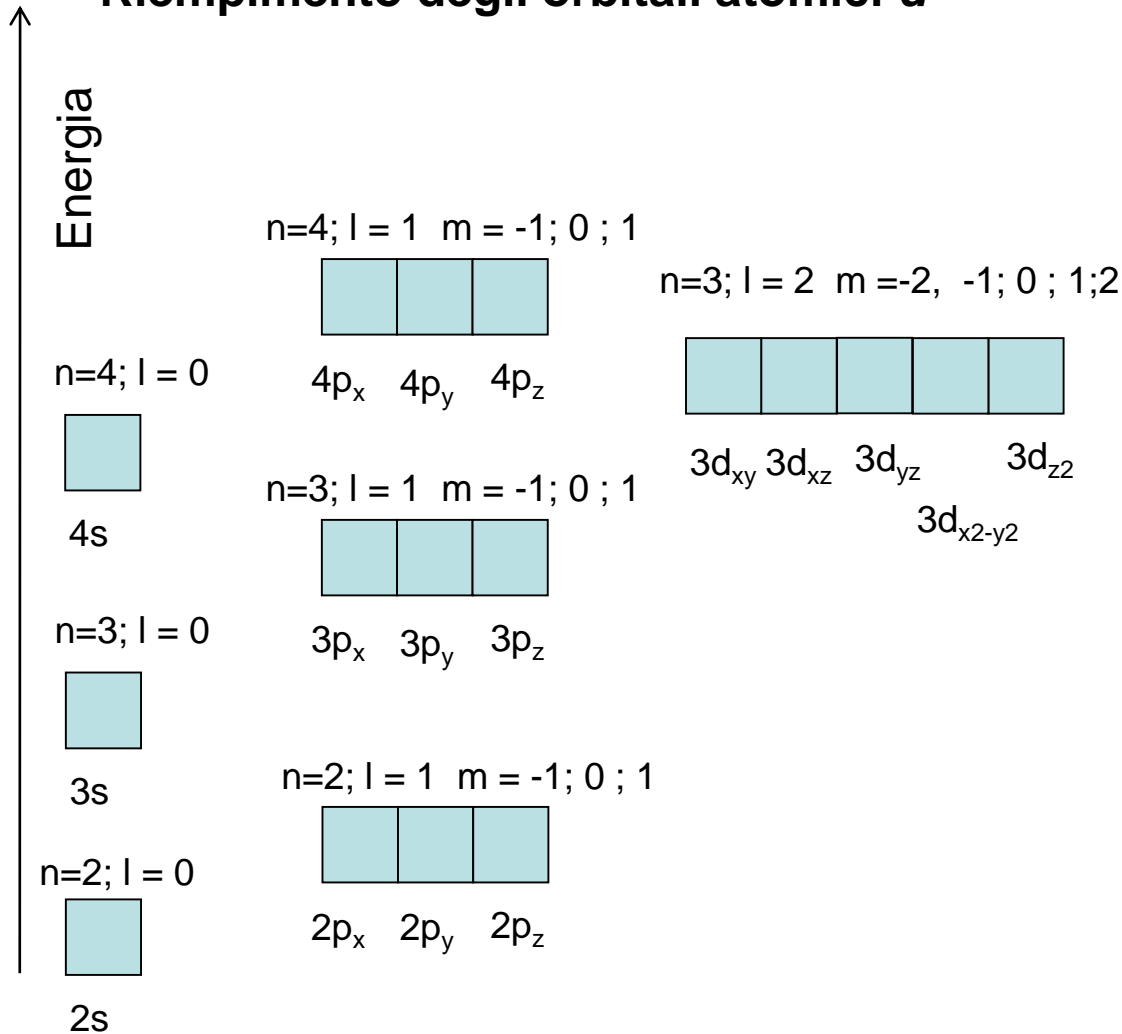


# Riempimento orbitali atomici con elettroni



#	Simbolo	K	L	M	N	O	P
<b>1. Periodo</b>		1s	2s	2p	3s	3p	3d
1	<u>H</u>	1					
2	<u>He</u>	2					
<b>2. Periodo</b>		1s	2s	2p	3s	3p	3d
3	<u>Li</u>	2	1				
4	<u>Be</u>	2	2				
5	<u>B</u>	2	2	1			
6	<u>C</u>	2	2	2			
7	<u>N</u>	2	2	3			
8	<u>O</u>	2	2	4			
9	<u>F</u>	2	2	5			
10	<u>Ne</u>	2	2	6			
<b>3. Periodo</b>		1s	2s	2p	3s	3p	3d
11	<u>Na</u>	2	2	6	1		
12	<u>Mg</u>	2	2	6	2		
13	<u>Al</u>	2	2	6	2	1	
14	<u>Si</u>	2	2	6	2	2	
15	<u>P</u>	2	2	6	2	3	
16	<u>S</u>	2	2	6	2	4	
17	<u>Cl</u>	2	2	6	2	5	
18	<u>Ar</u>	2	2	6	2	6	

# Riempimento degli orbitali atomici d



3. Periodo		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d
11	<u>Na</u>	2	2	6	1					
12	<u>Mg</u>	2	2	6	2					
13	<u>Al</u>	2	2	6	2	1				
14	<u>Si</u>	2	2	6	2	2				
15	<u>P</u>	2	2	6	2	3				
16	<u>S</u>	2	2	6	2	4				
17	<u>Cl</u>	2	2	6	2	5				
18	<u>Ar</u>	2	2	6	2	6				
4. Periodo		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d
19	<u>K</u>	2	2	6	2	6	..	1		
20	<u>Ca</u>	2	2	6	2	6	..	2		
21	<u>Sc</u>	2	2	6	2	6	1	2		
22	<u>Ti</u>	2	2	6	2	6	2	2		
23	<u>V</u>	2	2	6	2	6	3	2		
24	<u>Cr</u>	2	2	6	2	6	5	1		
25	<u>Mn</u>	2	2	6	2	6	5	2		
26	<u>Fe</u>	2	2	6	2	6	6	2		
27	<u>Co</u>	2	2	6	2	6	7	2		
28	<u>Ni</u>	2	2	6	2	6	8	2		
29	<u>Cu</u>	2	2	6	2	6	10	1		
30	<u>Zn</u>	2	2	6	2	6	10	2		
31	<u>Ga</u>	2	2	6	2	6	10	2	1	
32	<u>Ge</u>	2	2	6	2	6	10	2	2	

Nota: nei **metalli nobili** la configurazione più stabile richiede che gli orbitali d siano pieni. Un elettrone s viene perciò trasferito in un orbitale d.

20 Ca $4s^2$	21 Sc $4s^2 3d^1$	22 Ti $4s^2 3d^2$	23 V $4s^2 3d^3$	24 Cr $4s^1 3d^5$	25 Mn $4s^2 3d^5$	26 Fe $4s^2 3d^6$	27 Co $4s^2 3d^7$	28 Ni $4s^2 3d^8$	29 Cu $4s^1 3d^{10}$	30 Zn $4s^2 3d^{10}$
--------------------	-------------------------	-------------------------	------------------------	-------------------------	-------------------------	-------------------------	-------------------------	-------------------------	----------------------------	----------------------------

**Cu**      **Z = 29**     **$4s^1 3d^{10}$**

**Ag**      **Z = 47**     **$5s^1 4d^{10}$**

**Au**      **Z = 79**     **$6s^1 5d^{10} 4f^{14}$**

In altri metalli invece, quali Cr e Mo, la configurazione più stabile prevede il trasferimento di elettroni in modo da avere **orbitali d semipieni**.

**Cr**      **Z = 24**     **$4s^1 3d^5$**

**Mo**      **Z = 42**     **$5s^1 4d^5$**