

Esame di Fisica della materia 09/07/2018

Esercizio 1: Si consideri uno ione di He⁺ nel ground state elettronico.

- Si calcoli il valore di aspettazione dell'energia cinetica e potenziale dell'elettrone in questo stato.
- Si calcoli il valore di r oltre il quale il moto della particella è classicamente proibito ($E_{kin} < 0$).
- Si calcoli qual'è la probabilità di trovare l'elettrone nella regione di spazio classicamente proibita.
- Si aggiunga ora al problema un secondo elettrone in uno stato eccitato ($n > 1$). Si scriva l'energia dell'atomo di He neutro in stati eccitati caratterizzati dal secondo elettrone negli stati $n=2,3$ e 4, considerando che l'elettrone nel ground state schermi completamente una unità della carica nucleare.
- Per quale degli stati al punto d) otterremo un valore di energia che mi da la migliore approssimazione ai valori sperimentali? Si discuta brevemente il risultato.

Esercizio 2: Una molecola di HCl, caratterizzata da una transizione vibrazionale tra il ground state ($n=0$) ed il primo stato eccitato ($n=1$) di energia 2885cm^{-1} .

- Si consideri la massa H molto piccola rispetto a quella del Cl e nel limite armonico si calcoli la costante elastica di accoppiamento (k) tra gli ioni e la si esprima in unità di g/s^2 (indicazione: suggerimento si consideri la molecola come un oscillatore armonico classico e si ottenga un'espressione approssimata della costante elastica trascurando i livelli rotazionali).
- Nello stesso limite armonico si calcoli il numero medio di eccitazioni di una molecola in uno stato vibrazionale coerente in cui l'oscillazione dell'atomo H abbia un'ampiezza massima di 10^{-9}m .
- Quale sarà la distribuzione di probabilità del numero di fononi per lo stato al punto d)? Come evolveranno posizione e momento nel tempo?
- Si calcoli il displacement quadratico medio dell'atomo di H rispetto alla sua posizione di equilibrio per una molecola di HCl a 3000K.
($m_H = 1,66 \cdot 10^{-24}\text{g}$; $1\text{cm}^{-1} = 0,03\text{THz} = 0,00012\text{eV}$; Cl peso atomico 35)

Domande:

- Si considerino gli operatori di spin S_x ed S_y si calcoli il valore di $S_x S_y + S_y S_x$ e S_x^2
- Si dia la definizione del operatore momento angolare totale J e si calcoli il commutatore tra J^2 e J_z partendo dalle regole di commutazione per L ed S.
- Si discutano le correzioni ai livelli energetici nell'atomo di idrogeno dovute alle interazioni di spin orbita.
- Si ricavi l'espressione per orbitali leganti ed antileganti della molecola di H_2^+ . Si disegni la densità di carica per i due orbitali e si grafichi l'energia di orbitale legante ed antilegante in funzione della distanza tra i due atomi.
- Si descriva brevemente l'approssimazione di Born-oppenheimer ed il significato della non crossing rule.

Shell	Quantum numbers n	l	m	Spectroscopic notation	Wave function $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
K	1	0	0	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$
L	2	0	0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$
			0	2p ₀	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0) \cos \theta$
			± 1	2p _{± 1}	$\mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$

Tabella: Funzioni d'onda atomo di idrogeno in coordinate polari.