

Esame di Fisica della materia 25/06/2018

Esercizi:

- 1) Consideriamo un atomo di idrogeno che a $t=0$ si trova in una funzione d'onda data dalla sovrapposizione di autostati ψ_{nlm} tale per cui $\varphi(r, t = 0) = A[2\psi_{100} + \psi_{200} + \psi_{210}]$.
 - a) Si normalizzi la funzione d'onda
 - b) Si tratta di una funzione d'onda pari? Dispari?
 - c) Si calcoli la probabilità di trovare il sistema nel *ground state* elettronico, nello stato 200, 210 e 311.
 - d) Si calcoli il valore di aspettazione dell'energia totale e degli operatori L^2 ed L_z e la loro evoluzione temporale. Evolvono nel tempo?
 - e) Si calcoli il raggio medio dell'atomo in questo stato e la sua evoluzione temporale. Evolve nel tempo?

- 2) Una molecola di HCl è caratterizzata da una transizione vibrazionale tra il ground state ($n=0$) ed il primo stato eccitato ($n=1$) di energia 2885cm^{-1} .
 - a) Si calcoli la probabilità di eccitazione dello stato $n=1$ all'equilibrio termico a $T= 300\text{K}$.
 - b) Si calcoli la massa ridotta di HCl.
 - c) Si calcoli la costante elastica di accoppiamento (k) tra gli ioni e la si esprima in unità di g/s^2 (indicazione: si ottenga un'espressione approssimata trascurando i livelli rotazionali).
 - d) Si consideri la massa H molto piccola rispetto a quella del Cl e nel 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 .
 - e) Quale sarà la distribuzione di probabilità per lo stato al punto d)? Come evolveranno posizione e momento nel tempo?
($U_{\text{ma}} = 1,66 \cdot 10^{-24}\text{g}$; $1\text{cm}^{-1} = 0,03\text{THz} = 0,00012\text{eV}$; Cl peso atomico 35)

Domande:

- 1) Si dimostri che L^2 , S^2 , J^2 e J_z formano un set di operatori che commutano.
- 2) Si enuncino e discutano brevemente le regole di selezione per atomi ad un elettrone.
- 3) Si introduca l'accoppiamento spin orbita per atomi a singolo elettrone e discuta la rimozione della degenerazione dei livelli energetici.
- 4) Si discutano lo screening ed i limiti asintotici del potenziale efficace per atomi a multi elettroni. Degenerazione dei livelli energetici.
- 5) Si enunci il principio di esclusione di Pauli e si introduca il determinante di Slater.
- 6) Si descriva l'approssimazione di Born-Oppenheimer.

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