

**Esame di Fisica della materia 26/02/2019**

**Esercizio 1:**

Consideriamo un atomo di idrogeno che a  $t=0$  si trova in una funzione d'onda data dalla sovrapposizione di autostati  $\psi_{nlm}$  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?

**Esercizio2**

Una molecola biatomica eteronucleare AB ha un potenziale di Morse

$$E(R) = D \left[ e^{-2\alpha(R-R_0)} - 2e^{-\alpha(R-R_0)} \right]$$

con  $D=4,62$  eV,  $\alpha=1,87 \text{ \AA}^{-1}$  (ed  $R_0=1,27 \text{ \AA}$ ). La molecola possiede un'energia di dissociazione di 4,487eV.

- 1) individuare la costante di forza della molecola;
- 2) la massa ridotta della molecola; (suggerimento: si usi la definizione di energia di punto  $(1/2h\nu)$  zero della molecola calcolata come differenza tra energia di dissociazione e minimo del potenziale).

**Domande:**

- 1) Si enuncino e discutano le regole di selezione per transizioni di dipolo tra livelli atomici diversi.
- 2) Si ricavi l'Hamiltoniana di interazione tra una particella senza spin, di carica  $q$  e massa  $m$  ed un campo elettromagnetico.
- 3) Per un sistema di due elettroni, si ricavino le funzioni d'onda di singoletto e tripletto per un sistema di due elettroni partendo dalle autofunzioni per elettroni singoli e si calcolino gli autovalori degli operatori  $S^2$  ed  $S_z$  per gli stati così ottenuti.
- 3) Si discutano lo screening ed i limiti asintotici del potenziale efficace per atomi a multi elettroni. Degenerazione dei livelli energetici.
- 4) Si descriva il metodo di Hatree-Fock per il calcolo dei livelli atomici in un atomo a multi elettroni. Si descriva in particolare la separazione dell'Hamiltoniana (particella singola e termini di interazione) ed il il ruolo dei termini diretti e di scambio ottenuti nel calcolo dell'energia.
- 5) Usando il metodo LCAO si ricavi l'espressione per orbitali leganti della molecola di H2 neutra. Si distinguano orbitali pari e dispari e ricavino le espressioni per le funzioni d'onda associate a legame covalente e ionico.

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 <sub>0</sub>	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0) \cos \theta$
	2	1	$\pm 1$	2p <sub><math>\pm 1</math></sub>	$\mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$

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