

STRUTTURA DELLA MATERIA 1
Corso di Laurea Specialistica in Fisica Computazionale
Facolta' di Scienze, Universita' di Udine
Anno Accademico 2001/02

II homework (entro mercoledì 20 febbraio 2002)

1. Energia di dissociazione

L'energia di dissociazione della molecola di idrogeno H_2 è di 4.46 eV, mentre quella della molecola di deuterio D_2 è di 4.54 eV. Determinare l'energia di punto zero della molecola di idrogeno. (*Indicazioni: il deutone ha un nucleo costituito da un protone e da un neutrone; considerare uguale la massa del protone e neutrone*)

2. Spettro rotazionale

Lo spettro della molecola HBr nel lontano infrarosso consiste di righe spaziate di 17 cm^{-1} . Si determinino le frequenze dello spettro corrispondente per la molecola DBr.

3. Potenziali adiabatici

Si determini la struttura rotazionale e lo spettro vibrazionale della molecola di HF nell'ipotesi che il potenziale internucleare sia approssimabile con la forma empirica:

$$V(R) = V_0[1 - \exp^{-\gamma(R-1)}]^2$$

dove $V_0 = 6.40 \text{ eV}$, $\gamma = 1.92 \cdot 10^{-7}$ e R è in unità di 1 \AA .

4. Stati elettronici

Si considerino due atomi di H a distanza $R \gg E_{eq}$, e gli orbitali atomici di tipo $1s$ centrati su ciascuno dei due atomi a e b , $\varphi_a(\mathbf{r})$ e $\varphi_b(\mathbf{r})$. Alle distanze che ci interessano trascuriamo l'integrale di sovrapposizione (o di overlap):

$$\int \varphi_a(\mathbf{r}) \varphi_b(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \approx 0$$

Per lo stato fondamentale (in approssimazione di Born-Oppenheimer) prendiamo una funzione d'onda elettronica approssimata della forma:

$$\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) \propto [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)][\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)]$$

Siano inoltre φ_g e φ_u gli orbitali molecolari (legante e antilegante) del problema:

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}) + \varphi_b(\mathbf{r})]; \quad \varphi_u(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}) - \varphi_b(\mathbf{r})]$$

- (a) La Ψ data soddisfa al principio di Pauli? E' autostato di S_z (componente z dello spin totale)? In caso affermativo con quale autovalore? E' autostato di S^2 ? In caso affermativo con quale autovalore? Trovare la costante di normalizzazione.
- (b) Dimostrare che la Ψ assegnata si può scrivere come combinazione lineare di due determinanti di Slater:

$$\Psi = \frac{c_1}{\sqrt{2}}|\varphi_g\bar{\varphi}_g| + \frac{c_2}{\sqrt{2}}|\varphi_u\bar{\varphi}_u|,$$

e trovare i coefficienti c_1 e c_2 . (*Nota: $|\phi\bar{\phi}|$ è una notazione compatta per indicare il determinante della matrice 2×2 fatta sulla base delle funzioni $\phi \equiv \phi(\mathbf{r})\alpha(\sigma)$ e $\bar{\phi} \equiv \phi(\mathbf{r})\beta(\sigma)$.*)