

**STRUTTURA DELLA MATERIA 1**  
**Corso di Laurea Specialistica in Fisica Computazionale**  
**Facolta' di Scienze, Universita' di Udine**  
**Anno Accademico 2003/04**

**II homework**

**1. Coesione della molecola di H<sub>2</sub>**

Si consideri la molecola di H<sub>2</sub> in stato fondamentale, alla sua separazione interatomica di equilibrio che è 0.74 Å. Si calcoli la quantità di carica elettronica che, in uno schema classico, si può pensare si trovi al centro dell'asse molecolare per giustificare l'energia di legame di 4.5 eV.

**2. Potenziali adiabatici**

Considerare una molecola biatomica con potenziale adiabatico approssimato dall'espressione analitica:

$$V(R) = -2V_0 \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \right)$$

dove  $\rho = r/a$  ( $a$  lunghezza caratteristica e  $V_0$  energia caratteristica, note).

Descrivere analiticamente in funzione di  $a$  e  $V_0$  lo spettro rotovibrazionale della molecola in approssimazione di rotatore rigido.

**3. Energia di dissociazione**

L'energia di dissociazione della molecola di idrogeno H<sub>2</sub> è di 4.46 eV, mentre quella della molecola di deuterio D<sub>2</sub> 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*)

**4. Stati elettronici**

Si consideri la molecola (LiH)<sup>2+</sup> (cioè LiH doppiamente ionizzata) che consiste in due elettroni in presenza di un protone e di un nucleo di  $Li$  separati dalla distanza internucleare  $R$ .

(i) qual è la configurazione elettronica di stato fondamentale?

(ii) Considerare il limite di nuclei separati (grandi valori di  $R$ ). Scrivere l'orbitale molecolare di energia più bassa.