

# Microfisica Quantistica - A.A. 2010/11

## Prova di esonero, 31 Maggio 2011

### • Esercizio 1:

Si consideri lo ione molecolare  $\text{H}_2^+$  nel suo stato fondamentale.

- (a) provare che l'orbitale molecolare LCAO costruito con orbitali atomici normalizzati 1s dell'atomo di H, per la distanza di equilibrio  $R_0 = 2.49a.u.$ , non soddisfa il teorema del viriale secondo cui  $\langle \hat{T} \rangle = -\langle \hat{V} \rangle/2$ ;
- (b) trovare il valore del parametro  $\alpha$  da usare in orbitali 1s modificati del tipo  $\alpha^{3/2}e^{-\alpha r}/\sqrt{\pi}$  per soddisfare il teorema del viriale. Mostrare che questo valore coincide con quello che minimizza l'energia variazionale.

Per la configurazione nucleare di equilibrio ( $R_0 = 2.49a.u.$ ) valgono le seguenti relazioni

$$\begin{aligned} \langle a | \frac{1}{r_a} | a \rangle &= 1 & \langle a | \frac{1}{r_b} | a \rangle &= 0.3776 \\ \langle a | \frac{1}{r_a} | b \rangle &= 0.289 & S = \langle a | b \rangle &= 0.4607 \end{aligned} \tag{1}$$

dove  $r_i$  ( $i=a,b$ ) indica la distanza dell'elettrone dal nucleo  $i$  e  $\langle \mathbf{r} | a \rangle$ ,  $\langle \mathbf{r} | b \rangle$  sono gli orbitali atomici 1s centrati sui due protoni a e b.

### • Esercizio 2:

Una polvere costituita da microcristalli, caratterizzati da un reticolo cubico semplice con un atomo per cella e lato della cella unitaria pari ad  $a = 3.6\text{\AA}$ , viene investito da una radiazione X con  $\lambda = 1.436\text{\AA}$ . Determinare per un qualunque ordine di riflessione:

- a) l'angolo minimo di deflessione;
- b) l'angolo massimo di deflessione.