

Microfisica Quantistica - A.A. 2011/12

Prova di esonero, 30 Maggio 2012

NOME:

MATRICOLA:

• **Esercizio 1:**

L'energia di legame dello stato 2s del F è di 40.2eV, mentre quella dello stato 2p è di 18.6eV. F forma una molecola fortemente polare con H (HF). In questo caso la funzione d'onda in LCAO per gli orbitali molecolari è data da

$$\Psi = c_H \phi_H + c_F \phi_F \quad (1)$$

Usando il principio variazionale sull'energia, si ricava che i livelli energetici della molecola sono gli zeri dell'equazione caratteristica corrispondente al determinante

$$\begin{vmatrix} \alpha_H - \epsilon & \beta \\ \beta & \alpha_F - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (2)$$

dove

$$\alpha_H = \langle \phi_H | \hat{h} | \phi_H \rangle \quad (3)$$

$$\alpha_F = \langle \phi_F | \hat{h} | \phi_F \rangle \quad (4)$$

$$\beta = \langle \phi_H | \hat{h} | \phi_F \rangle \quad (5)$$

e abbiamo trascurato l'integrale di sovrapposizione $S = \langle \phi_H | \phi_F \rangle$.

1. Dimostrare che le energie degli stati legante e antilegante sono

$$\epsilon_i = \alpha_i \pm \frac{\beta}{\tan(\phi)} \quad 2\phi = \arctan\left(\frac{2\beta}{\alpha_F - \alpha_H}\right) \quad (6)$$

2. Indicare quali orbitali atomici contribuiscono maggiormente a formare il legame e spiegare il perché
3. Valutare Ψ_+ (legante) e ϵ_+ ponendo $\beta = -1eV$ ed approssimare α_i con le energie di ionizzazione degli atomi isolati cambiate di segno. Dal risultato stabilire su quale dei due atomi che formano la molecola è maggiormente accumulata la carica degli elettroni di valenza.

Può essere utile ricordare che:

$$\frac{1}{\cos(2x)} = \frac{\tan(2x)}{\tan(x)} - 1 \quad (7)$$

• **Esercizio 2:**

Un cristallo, con reticolo cubico semplice di passo reticolare $a = 2\text{\AA}$ e con base di un solo atomo per cella elementare, è investito da un fascio di raggi X con lunghezza d'onda $0.5\text{\AA} < \lambda < 5\text{\AA}$. Se la radiazione incide lungo la direzione (100) del cristallo, oltre al picco non deviato, determinare l'angolo a cui si osserva la prima riflessione di Bragg.