

Microfisica Quantistica - A.A. 2013/14
Prova di esonero, 29 Maggio 2014

NOME:

MATRICOLA:

• **Esercizio 1:**

Sapendo che l'energia di dissociazione di H_2 è $E_d=4.5$ eV e che quella di H_2^+ è $E_d=2.6$ eV, determinare l'energia di ionizzazione di H_2 .

• **Esercizio 2:**

Si consideri un orbitale molecolare normalizzato per una molecola polare AB della forma

$$|\Psi\rangle = 0.7|\phi_A\rangle + 0.6|\phi_B\rangle \quad (1)$$

dove $|\phi_A\rangle$ e $|\phi_B\rangle$ sono, rispettivamente, gli orbitali atomici intorno ad A e B, normalizzati. Determinare

- (a) il valore dell'integrale di sovrapposizione $S = \langle\phi_A|\phi_B\rangle$
- (b) la probabilità che l'elettrone sia nell'orbitale atomico $|\phi_A\rangle$
- (c) la probabilità che l'elettrone sia nell'orbitale atomico $|\phi_B\rangle$
- (d) la probabilità che l'elettrone sia nell'orbitale atomico $|\phi_A\rangle$ nel caso in cui $S = 0$
- (e) la probabilità che l'elettrone sia nell'orbitale atomico $|\phi_B\rangle$ nel caso in cui $S = 0$
- (f) la probabilità che l'elettrone sia nella regione di spazio comune agli orbitali $|\phi_A\rangle$ e $|\phi_B\rangle$.

• **Esercizio 3:**

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 $\lambda \in [0.5\text{\AA}, 5\text{\AA}]$. Se la radiazione incide lungo la direzione (1 0 0) del cristallo, oltre al picco non deviato, determinare l'angolo a cui si osserva la prima riflessione alla Bragg.