

CRISPINO ANTONIO N85001519

RUGGIERO ALESSANDRA ANNA N85001438

Si stampi foglio traccia inserendo negli spazi vuoti le soluzioni

In aula, il 26.05.2025, si consegna questo foglio, stampato, con i risultati negli spazi, all'interno di una spilletta con i calcoli

Scrivere qui sotto e sulla spilletta Cognome - Nome - Matricola (per gruppo da due, entrambi i membri con cognome in ordine alfabetico)

1. Per la molecola LiF il potenziale nucleare può essere schematizzato con la seguente espressione:

$$E(R) = E(R \rightarrow \infty) - n^2 \frac{e^2}{R} + be^{-aR} - \frac{c}{R^6}, \quad (1)$$

dove n indica il valore assoluto delle cariche efficaci localizzate sui due atomi, $a = 3.25 \text{ \AA}^{-1}$, $b = 275 \text{ eV}$, $c = 2.68 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^6$, e il valore della lunghezza del legame è $R_0 = 1.564 \text{ \AA}$. Lo spettro puramente rotazionale della molecola presenta delle righe approssimativamente equispaziate di 2.68 cm^{-1} l'una dall'altra. Si chiede di:

1. determinare il valore della carica efficace n , discutendo il conseguente risultato; **$n = 0.90$, legame covalente**
2. determinare l'energia di punto zero della molecola in eV, in approssimazione armonica; **$E_0 \sim 0.0369 \text{ eV}$**
3. determinare l'energia in eV necessaria per dissociare dallo stato fondamentale la molecola di LiF nei due ioni che la costituiscono; **$D_0 = 6.04 \text{ eV}$**
4. discutere il significato fisico dei tre termini che compongono l'espressione dell'energia di cui sopra.

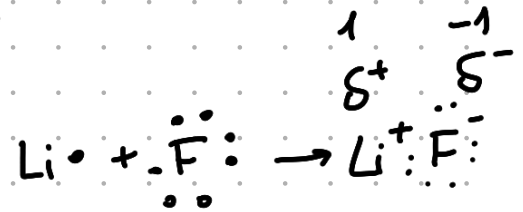
2. La molecola biatomica di idrogeno deuterato HD presenta spettri di assorbimento roto-vibrazionali all'ordine piú basso nell'accoppiamento alla radiazione elettromagnetica? Si giustifichi il risultato!

ES1

$$1) E(R) = E(R \rightarrow \infty) - n^2 \frac{e^2}{R} + b e^{-aR} - \frac{c}{R^6}$$

$$\left. \frac{dE}{dR} \right|_{R=R_0} = \frac{n^2 e^2}{R_0^2} - a b e^{-aR_0} + \frac{6c}{R_0^7} = 0$$

$$n^2 = \frac{R_0^2}{e^2} \left[a b e^{-aR_0} - \frac{6c}{R_0^7} \right] \sim 0,90$$



$n < |S|$, si deduce che il legame è covalente.

$$2) E(R) \approx E(R_0) + \frac{1}{2} K \rho^2 \quad \text{sviluppo intorno ad } R_0.$$

energia di stato fondamentale:

$$\frac{\hbar \omega}{2} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

$$K = \left. \frac{d^2 E(R)}{dR^2} \right|_{R=R_0} = -\frac{2n^2 e^2}{R_0^3} + a^2 b e^{-aR_0} - 42 \frac{c}{R_0^8} = 1,4 \times 10^2 \text{ J/m}^2$$

$$K = 8,75 \text{ eV/\AA}^2 \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}} = 1,12 \times 10^{14} \text{ rad/s}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 = 5,91 \times 10^{-21} \text{ J} \sim 0,0369 \text{ eV}$$

$$3) \underbrace{D}_{\text{eu. dissociazione}} = \underbrace{D_p}_{\text{energia buca al minimo}} - E_0 \quad D_p = -E(R_0)$$

$$E(R_0) = -\frac{n^2 e^2}{R_0} + b e^{-aR_0} - \frac{c}{R_0^6} \quad n = 6,07 \text{ eV} < 0$$

$$D = D_p - E_0 = 6,04 \text{ eV}$$

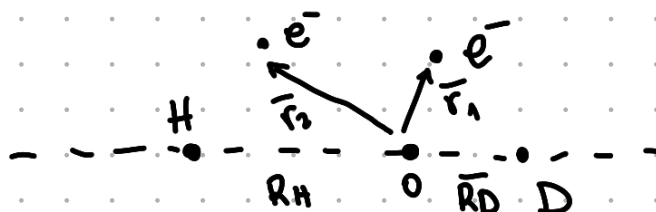
- 4) • $-\frac{n^2 e^2}{R}$ → attrazione coulombiana tra le distribuzioni di carica efficace (n) dei due atomi;
 • $b e^{-aR}$ → repulsione tra le nubi elettroniche;

- $C/R^6 \rightarrow$ termine attrattivo dipolo-dipolo.

ESERCIZIO 2

H₂D

$M_D > M_H$, O origine del CDM



$$\vec{D} = e(\vec{R}_O + \vec{R}_H - \vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad \leftarrow \text{elementi di matrice del dipolo elettrico accoppiamento alla rad. e.m.}$$

Per lo spettro roto-vibrazionale:

$$\langle n r J M_J | \hat{\epsilon} \cdot \vec{D} | n' r' J' M' \rangle \propto$$

↑
vettore di polarizzazione

$$\propto \langle n r J M_J | \hat{\epsilon} \cdot (\vec{R}_O + \vec{R}_H) | n' r' J' M' \rangle \neq 0 \Rightarrow \text{ovvero sono presenti spettri roto-vibrazionali.}$$

Da cui il contributo di $-\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ è nullo.

Li.