

# Esercizi Materia

Aurora Leso

May 2021

# 1 Esercizi tratti dalle lezioni 2019/2020 e 2020/2021

## 1.1 Fisica Atomica

### 1.1.1 Esercizio 1, 16 aprile 2021

Si consideri l'atomo di idrogeno e si calcoli la probabilità di trovare l'elettrone in nello stato  $\langle \psi_{n,l,m_l} \rangle$  con  $n=2$ ,  $l=0$  quando  $d \leq a_0$  trascurando correzioni di Spin-Orbita, Darwin e relativistiche.

## Soluzione

Considerando l'hamiltoniana come

$$H = T(\text{cinetica}) + V(\text{potenziale}) \quad (1)$$

ove

$$V = \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} \quad (2)$$

ed  $r$  distanza elettrone-nucleo.

Trovandoci nella situazione di un atomo di idrogeno, possiamo porci, per semplicità, nel sistema di riferimento del Centro di massa con autofunzioni  $\psi_{n,l,m_l}$ .

Sotto queste ipotesi,

$$\psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(\vec{r}) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3)$$

La probabilità richiesta è ovviamente definita come

$$P_{n,l} = \int_0^{a_0} |r \cdot R_{n,l}(\vec{r})|^2 dr \int_{\Omega} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\Omega \quad (4)$$

Ricordando però che, per come sono costruite, le armoniche sferiche risultano normalizzate, e dunque

$$\int_{\Omega} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\Omega = 1 \quad (5)$$

non ci resta che calcolare

$$P_{n,l} = \int_0^{a_0} |r \cdot R_{n,l}(\vec{r})|^2 dr \quad (6)$$

Dalle tabelle si evince che, se  $n=2$  e  $l=0$ ,

$$R_{n=2,l=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot a_0^{-\frac{3}{2}} \cdot \left[1 - \frac{r}{2a_0}\right] \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (7)$$

Dunque l'integrale da calcolare è sostanzialmente il seguente:

$$P_{n=2,l=0} = \int_0^{a_0} \left| r \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot a_0^{-\frac{3}{2}} \cdot \left[1 - \frac{r}{2a_0}\right] \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \right|^2 dr \quad (8)$$

Tramite la sostituzione

$$\begin{cases} x = \frac{r}{a_0} \\ dr = dx \cdot a_0 \end{cases}$$

l'integrale risulta del tipo

$$\int_0^1 \left(\frac{x}{a_0}\right)^2 \frac{1}{2} a_0^{-3} \cdot \left[1 - \frac{x}{2}\right]^2 e^{-\frac{x}{2}} \cdot a_0 dx \quad (9)$$

tramite le dovute semplificazioni, e notando che si giunge a un integrale iterato del tipo

$$\begin{aligned} I_n &= \int x^n e^{-x} dx - \int n \cdot x^{n-1} e^{-x} dx \\ &= -x^n e^{-x} - n \cdot I_{n-1} \end{aligned} \quad (10)$$

Si tratta di diversi conti per giungere al risultato, ossia

$$P_{n=2,l=0} \simeq 3.43 \cdot 10^{-2}$$

### 1.1.2 Esercizio 2, 16 aprile 2021

Calcolare l'energia di prima ionizzazione e il raggio dell'orbita nello stato fondamentale dell'idrogeno quando cattura un mesone.

Considerare che  $m_\mu = 206.8 m_e$ , con  $m_e$  massa dell'elettrone.

#### Soluzione

La massa ridotta del sistema idrogeno+mesone risulta

$$m_r = \frac{m_H \cdot m_\mu}{m_H + m_\mu} \simeq 185.9 m_e \quad (11)$$

Questa aggregazione può essere vista come nucleo un po' più grande e 1 elettrone che gli orbita attorno.

Nell'ipotesi che il sistema sia un idrogeno arricchito dal mesone, cioè con massa ridotta  $m_r$ , l'energia di ionizzazione è pari all'opposto dell'energia del primo stato di idrogeno.

Riprendendo i valori di  $E_n$  per un atomo idrogenoide

$$E_n = -\frac{1}{2e} m_e c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \text{eV} \quad (12)$$

Ponendo  $Z=1$  e ricordando che  $m_e \rightarrow m_r$  si ottiene

$$E_{\text{ionizzazione}} = -E_{n=1, Z=1} = \frac{1}{2e} m_r c^2 \alpha^2 \simeq 2.53 \text{eV} \quad (13)$$

Per quanto concerne invece il raggio dell'orbita dello stato fondamentale, sempre ricordando quanto vale per l'atomo idrogenoide:

$$a_{0H+\mu} = \frac{\hbar}{m_r c \alpha} = \frac{a_0}{185.9} \simeq 2.85 \cdot 10^{-13} m \quad (14)$$

### 1.1.3 Esercizio 3, 21 aprile 2021

Considerare un atomo di elio con un elettrone in 1s. Assumere autofunzioni di tipo idrogenoide con  $Z=2$ . Calcolare il potenziale cui è sottoposto il secondo elettrone se collocato a  $r = \frac{a_0}{2}$ , ove  $a_0$  è il raggio dell'orbita per lo stato fondamentale dell'idrogeno.

#### Soluzione

L'autofunzione del primo elettrone è quella dello stato fondamentale 1s: sfruttando le tabelle fornite, sia

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{a_0} \cdot e^{-\frac{Zr_1}{a_0}} \quad (15)$$

con  $\vec{r}_1$  il vettore posizione del primo elettrone. Con queste ipotesi il potenziale risulta

$$V(r_2) = \underbrace{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{\text{Coulomb}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{|\psi_{1s}|^2}{r_{12}} dr_1^3}_{\text{Interaction } e-e} \quad (16)$$

Usando coordinate sferiche, per cui

$$\begin{cases} r_{12} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\theta)} \\ dr_{12}^3 = r_1^2 dr_1 \sin(\theta) d\theta d\phi \end{cases}$$

posso scrivere

$$V(r_2) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot I \quad (17)$$

ove

$$I = \int \frac{|\psi_{1s}(r_1^2)| r_1^2 dr_1 d\phi \sin(\theta) d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\theta)}} \quad (18)$$

Questo è un integrale parecchio scomodo da calcolare, quindi è lecito lasciar espresso il suddetto come **I**. Dopo una serie di calcoli, si giunge (con probabili errori di conto)

$$V(r_2) = -\frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{Z}{a_0} + \frac{1}{r_2} \right) \cdot e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}} \simeq -69.2 \text{V}/m \quad (19)$$

## 1.2 Fisica molecolare

### 1.2.1 Esercizio 1, lez.37 2020

Un reticolo cristallino è descritto da una cella convenzionale ortorombica con base. I vettori primitivi del reticolo siano:

- $\mathbf{a}_1 = a\hat{u}_x$
- $\mathbf{a}_2 = b\hat{u}_y$
- $\mathbf{a}_3 = c\hat{u}_z$

con

$$\begin{cases} a = 1\text{\AA} \\ \frac{b}{a} = 1.5 \\ \frac{c}{a} = 1.75 \end{cases}$$

La base sia formata da due atomi situati in  $(0,0,0)$  e  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . Si determinino i vettori del reticolo reciproco e l'angolo formato tra i vettori del reticolo reciproco  $G_{100}$  e  $G_{114}$ .

**Soluzione** Nel reticolo reciproco, la base  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  con

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \end{cases}$$

Ove  $V_c$  è il volume della cella e  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  sono i vettori base del reticolo diretto.

Per definizione,

$$V_c = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \quad (20)$$

Perciò, sostituendo quanto appena detto (eq. 20) nelle espressioni dei vettori del reticolo inverso  $\vec{b}_i$  si ottiene:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} b\hat{u}_y \times c\hat{u}_z = \frac{2\pi}{a \underbrace{\hat{u}_x \cdot \hat{u}_y \times \hat{u}_z}_{\hat{u}_x}} \underbrace{b\hat{u}_y \times c\hat{u}_z}_{\hat{u}_x} = \frac{2\pi}{a \underbrace{\hat{u}_x \cdot \hat{u}_x}_1} \hat{u}_x = \frac{2\pi}{a} \hat{u}_x \quad (21)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} c\hat{u}_z \times a\hat{u}_x = \frac{2\pi}{b \underbrace{\hat{u}_x \cdot \hat{u}_y \times \hat{u}_z}_{\hat{u}_x}} \underbrace{c\hat{u}_z \times a\hat{u}_x}_{\hat{u}_y} = \frac{2\pi}{b \underbrace{\hat{u}_x \cdot \hat{u}_x}_1} \hat{u}_y = \frac{2\pi}{b} \hat{u}_y \quad (22)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} a\hat{u}_x \times b\hat{u}_y = \frac{2\pi}{c \underbrace{\hat{u}_x \cdot \hat{u}_y \times \hat{u}_z}_{\hat{u}_x}} \underbrace{a\hat{u}_x \times b\hat{u}_y}_{\hat{u}_z} = \frac{2\pi}{c \underbrace{\hat{u}_x \cdot \hat{u}_x}_1} \hat{u}_z = \frac{2\pi}{c} \hat{u}_z \quad (23)$$

Quindi, si ottiene

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{u}_x \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{b} \hat{u}_y \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \hat{u}_z \end{cases}$$

Per quanto concerne le unità di misura, si ha

$$a = 1\text{\AA} \Rightarrow b = 1.5\text{\AA}, c = 1.75\text{\AA} \quad (24)$$

e dunque si hanno le unità di misura

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \text{\AA}^{-1} \\ \vec{b}_2 = \frac{2}{3} \text{\AA}^{-1} \\ \vec{b}_3 = \frac{7}{4} \text{\AA}^{-1} \end{cases}$$

Per quanto concerne l'angolo tra  $\vec{G}_{100}$  e  $\vec{G}_{114}$  vado a considerare il prodotto scalare, ossia

$$\vec{G}_{100} \cdot \vec{G}_{114} = |\vec{G}_{100}| |\vec{G}_{114}| \cos(\theta) \quad (25)$$

Per definizione, con indici di Miller  $(h, k, l) = (1, 0, 0)$

$$\vec{G}_{100} = 1 \cdot \vec{b}_1 + 0 \cdot \vec{b}_2 + 0 \cdot \vec{b}_3 = \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{u}_x \quad (26)$$

e con  $(h, k, l) = (1, 1, 4)$

$$\vec{G}_{100} = 1 \cdot \vec{b}_1 + 1 \cdot \vec{b}_2 + 4 \cdot \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{u}_x + \frac{2\pi}{b} \hat{u}_y + \frac{8\pi}{c} \hat{u}_z = 2\pi \cdot \left( \frac{1}{a} \hat{u}_x + \frac{1}{b} \hat{u}_y + \frac{4}{c} \hat{u}_z \right) \quad (27)$$

Svolgendo il prodotto scalare si ha

$$\frac{(2\pi)^2}{a^2} = \frac{(2\pi)^2}{a} \sqrt{\left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{4^2}{c^2} \right) \cos(\theta)} \Rightarrow \theta \simeq 67.22^\circ \quad (28)$$

### 1.2.2 Esercizio 2, lez.37 2020

Si consideri un reticolo bidimensionale ove il reticolo reciproco è esagonale e i vettori primitivi siano forniti dalla seguente espressione:

$$\begin{cases} b_1 = a \hat{u}_x \\ b_2 = a \cdot \sin(30) \hat{u}_x + a \cdot \cos(30) \hat{u}_y \\ a = 1 \text{Å} \end{cases}$$

Si determinino i vettori primitivi del reticolo diretto in coordinate cartesiane e si identifichi il tipo di reticolo.

### Soluzione

Assumiamo che

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \alpha_1 \hat{x} + \beta_1 \hat{y} \\ \vec{a}_2 = \alpha_2 \hat{x} + \beta_2 \hat{y} \end{cases}$$

E' noto, per proprietà del reticolo inverso, che

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (29)$$

perciò

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi = \alpha_1 a \Rightarrow \alpha_1 = \frac{2\pi}{a} \quad (30)$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = 0 = -\alpha_1 \frac{a}{2} + \beta_1 a \frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow \beta_1 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \quad (31)$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0 = \alpha_2 a \Rightarrow \alpha_2 = 0 \quad (32)$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = 2\pi = -\alpha_2 \frac{a}{2} + \beta_2 a \frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow \beta_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \quad (33)$$

Quindi

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \alpha_1 \hat{x} + \beta_1 \hat{y} = \frac{2\pi}{a} \hat{x} + \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y} \\ \vec{a}_2 = \alpha_2 \hat{x} + \beta_2 \hat{y} = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y} \end{cases}$$

### 1.2.3 Esercizio 3, lez.37 2020

Calcolare la densità atomica di una specie chimica sapendo che la distanza  $R_0$  tra i centri degli atomi primi vicini è  $3.03 \text{Å}$  e che cristallizza in un sistema bcc (corpo centrale).

### Soluzione

Ricordando come possiamo definire la densità atomica, ossia

$$\rho = \frac{N_{atoms}}{V} \quad (34)$$

in un sistema cubico a corpo centrato

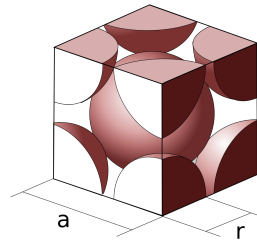


Figure 1: Schema per un cristallo bcc

la diagonale maggiore ha lunghezza  $d = \sqrt{3}a$  con  $a$  parametro di cella. Prendendo  $R$ =raggio della sfera, si ha come distanza tra due centri  $R_0 = 2R$  quindi

$$2R_0 = \sqrt{3}a \Rightarrow a = \frac{2R_0}{\sqrt{3}} \quad (35)$$

E il volume della cella è

$$V = a^3 = \frac{8R_0^3}{3\sqrt{3}} \quad (36)$$

Analizzando la struttura bcc, ci accorgiamo che sono presenti

- 8 atomi sui vertici, ciascuno condiviso da 8 celle e quindi con fattore di occupazione  $\frac{1}{8}$ ;
- 1 atomo al centro

perciò in totale si hanno

$$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ atomi} \quad (37)$$

dunque

$$\rho = \frac{2}{\frac{8}{3\sqrt{3}}R_0^3} \simeq 4.67 \cdot 10^{27} \frac{\text{atoms}}{\text{cm}^3} \quad (38)$$

#### 1.2.4 Esercizio 4, lez.37 2020

Determinare la spaziatura interatomica di un cristallo di cloruro di sodio NaCl assumendo che la densità di NaCl sia circa  $2.16 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$  ed i pesi atomici di Na e Cl siano rispettivamente 23 e 35,46.

#### Soluzione

Il cloruro di sodio è un cristallo ionico puro la cui struttura può essere vista come un  $\text{Cl}^-$  collocato in un vertice e un  $\text{Na}^+$  traslato di  $\frac{a}{2}(\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z)$  ( $a$  parametro di cella) rispetto al Cloro:

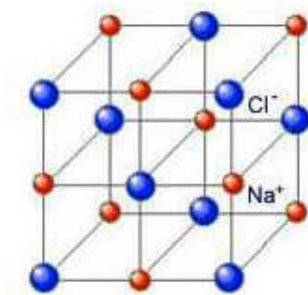


Figure 2: Struttura NaCl

Sia  $V$  il volume della cella, allora

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (39)$$

ove la massa e il volume saranno dati da

$$\begin{cases} V = (2d)^3 \\ m = n_{Na}p_{Na} + n_{Cl}p_{Cl} \end{cases}$$

con **d** distanza interatomica, **n** numero di moli e **p** peso atomico(fornito dal testo).

Il numero di moli si calcola come

$$n = \frac{N}{N_A} \quad (40)$$

ove  $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$  è il numero di Avogadro ed N è il numero di atomi di Sodio o di Cloro. Per il Sodio, dalla fig.2 contiamo

$$N_{Na} = \underbrace{N_{spig}}_{12} + \underbrace{N_{centro}}_1 = 12 \underbrace{\frac{1}{4}}_{\substack{fatt \\ occ}} + 1 = 4 \quad (41)$$

Analogamente per il cloro

$$N_{Cl} = \underbrace{N_{spig}}_8 + \underbrace{N_{centro}}_6 = 8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2} = 4 \quad (42)$$

Da ciò si desume che

$$m = \frac{4}{N_A}(23 + 35.46)g \Rightarrow \rho = 2.16 \frac{g}{cm^3} = \frac{\frac{4}{N_A}(23 + 35.46)g}{8d^3} \Rightarrow d \simeq 2.82 \text{Å} \quad (43)$$