

Fisica Atomica e Molecolare A.A. 2017/18

Compito d'esonero

4 giugno 2018

Problema 1

Una molecola biatomica AB di massa ridotta 0.95 amu sottoposta ad una radiazione elettromagnetica mostra una serie di righe di assorbimento alle posizioni in cm^{-1}

3859.6 3929.2 3998.8 4068.4 4207.6 4277.2 4346.2

Determinare:

- il valore della costante rotazionale;
- il valore della frequenza vibrazionale fondamentale;
- la distanza di equilibrio dei due nuclei;
- dove si trova la riga con il massimo di intensità, assumendo che la temperatura sia di 300 K.

Punteggio massimo 12

Problema 2

Si consideri la molecola LiCl con legame ionico nello stato fondamentale elettronico. La sua energia potenziale si può approssimare con il potenziale

$$V(R) = V_0 + ae^{-\alpha R} - \frac{b}{R}$$

con $R_0 = 2.021 \text{ \AA}$, $b = 21.66 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$, $\alpha = 2 \text{ \AA}^{-1}$. Assumendo valida l'approssimazione armonica calcolare la costante di forza interatomica in J/m^2 e la frequenza del quanto vibrazionale fondamentale in cm^{-1} .

Masse atomiche: $m_{Li} = 7 \text{ amu}$, $m_{Cl} = 35 \text{ amu}$.

Punteggio massimo 12

Domanda

Descrivere in breve in cosa consiste l'approssimazione di Born-Oppenheimer.

Punteggio massimo 6