

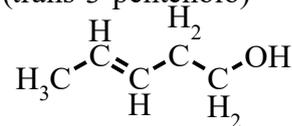
Corso di Laurea (triennale) in Chimica Industriale - 2° anno - A. A. 2021-22
Lunedì 13-2-2023 - prova scritta del 2° appello 2023 di CHIMICA FISICA 2

Nome e Cognome _____ Matr. n. _____

- 0) A Determinare l'operatore equivalente al seguente commutatore, $\left[\frac{d^2}{dx^2}, (x + y^3) \right]$,
 supponendo di operare sulla funzione $f(x,y)$.
- 0) B La funzione lavoro del cesio metallico è 2.14 eV. Calcolare l'energia cinetica e la velocità degli elettroni espulsi da una luce di lunghezza d'onda di 300 nm.
- 1) La costante di forza di $^{79}\text{Br}-^{79}\text{Br}$ è 240 N·m⁻¹. Considerando la molecola come un oscillatore armonico quantistico,
 1) calcolare:
 i. la frequenza vibrazionale fondamentale della molecola;
 ii. la sua energia di punto zero;
 iii. il numero di righe presenti nello spettro di assorbimento vibrazionale;
 iv. il rapporto tra le popolazioni del terzo (n_3) e del secondo (n_2) stato vibrazionale a $T=77$ K.
 2) Scrivere l'espressione dell'energia **potenziale** vibrazionale in approssimazione armonica e le regole di selezione per le transizioni vibrazionali.
 [1 u.m.a.= $1,66 \cdot 10^{-27}$ Kg ; $k_B=1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K]

- 2A) Una configurazione elettronica eccitata dell'atomo di zirconio (Zr) è: $[\text{Kr}]4d^1 5s^2 5p^1$.
 a - trovare i termini spettroscopici che derivano da tale configurazione;
 b - specificare il valore di tutti i numeri quantici associati a tali termini;
 c - indicare a quanti microstati corrisponde ogni termine **senza** tenere conto di J;
 d - indicare a quanti microstati corrisponde ogni termine, **tenendo conto** di J;
 e - per ognuno dei termini spettroscopici trovati, calcolare (in unità atomiche cioè in unità di \hbar) il modulo quadro del momento angolare totale.
- 2B) a) Stabilire a quale regione dello spettro elettromagnetico appartiene una radiazione con numero d'onda $\tilde{\nu} = 80000$ cm⁻¹. Trovare l'ordine di grandezza dell'energia di tale radiazione e dire se essa potrebbe portare un atomo dallo stato elettronico fondamentale ad uno stato eccitato?
 b) Elencare le regole di selezione per le transizioni tra stati elettronici diversi negli atomi a molti elettroni.

- 3) Si consideri la molecola mostrata nella figura seguente (trans-3-pentenolo)



Usando l'approssimazione di Huckel:

- a) Calcolare l'energia degli orbitali molecolari π ($\Psi_{\pi-i}$);
 b) disegnare uno schema dell'energia degli orbitali molecolari π e distribuire in essi gli elettroni π ; poi calcolare l'energia tot. degli elettroni π e l'energia di delocalizzazione $E_{\text{deloc.}}$;
 c) trovare l'espressione LCAO (con coefficienti ottenuti numericamente, non solo in simboli) di tutti gli orbitali molecolari π normalizzati $\Psi_{\pi-i}$.