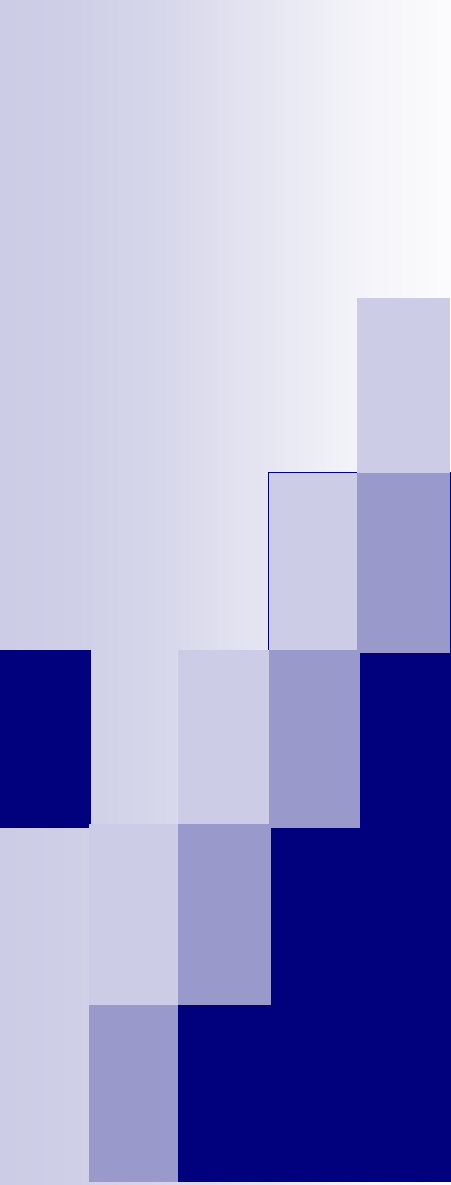




Exàmens

Física Atòmica i Molecular
Febrer 2007

1.-

- a) Considerar la densitat $\rho(r)$ d'un àtom neutre quan r tendeix a infinit. De quina manera decau $\rho(r)$ amb r en els models de Thomas-Fermi, Hartree i Hartree-Fock? En quin model ho fa més ràpidament? (1.5p)
- b) Compara el desdoblament per espí-òrbita del nivell $3d$ dels àtoms hidrogenoides amb $Z = 10$ i $Z = 80$. (1.5p)

2.- Considerar els estats de la configuració d^2 en esquema LS amb el valor més alt possible de J .

- a) Dóna les energies d'aquests estats referides al *core* inert, en funció de integrals de les parts radials. Tenir en compte les correccions de H_1 i H_2 . (1.5p)
- b) Fixem-nos en la transició que connecta els màxims valors de M_J entre els estats anteriors. Com es modifica la seva energia dins un camp magnètic de 20 kG. (1p)

3.- El ritme de la transició $2p \rightarrow 1s$ d'un àtom de hidrogen per emissió espontània és $W_{esp} = 6.02 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. Determinar el ritme d'emissió estimulada:

- a) si l'àtom està en el camp de radiació de Planck, a una temperatura $T = 10^4 \text{ K}$. (1p)
- b) del He^+ en les mateixes condicions de a). (1.5p)

4.- La molècula d'oxigen O_2 té configuració π_g^2 :

- a) construir els orbitals moleculars π_g a partir dels orbitals atòmics de les capes $2s$ i $2p$ de l'àtom aïllat; (1p)
- b) dóna una funció de prova per a l'estat fonamental $\pi_g^2 : {}^3\Sigma_g^-$. (1p)

Temps permès: 3h

Es poden consultar apunts i llibres.

Física Atòmica i Molecular
Setembre 2007

1.- Definim els valors esperats següents

$$\langle r^n \rangle = \int d^3r \rho(r) r^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

on $\rho(r)$ és la densitat electrònica. Obtenir en el model de Tomas-Fermi la dependència amb Z de $\langle r^n \rangle$ per a àtoms neutres. Per a quins valors de n és convergent? (1.5p)

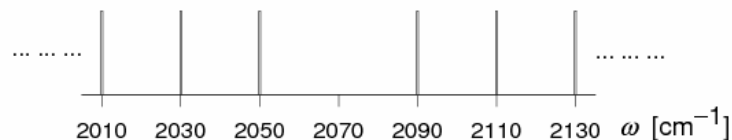
2.- Considerar els estats de la configuració pd

- a) Classificar tots els estats possibles, donant les seves etiquetes, a l'esquema LS (1p)
- b) Repetir l'apartat anterior, ara a l'esquema jj . (1p)
- c) A l'esquema LS , donar les energies dels estats que formen el multiplet amb $S = 1$ i $L = 3$. (1.5p)
- d) Analitzar la fragmentació de l'estat de J mínima del multiplet anterior dins un camp magnètic de 20 kG. (1p)

3.- Compara les vides mitjanes per emissió espontània τ de la transició $2p \rightarrow 1s$ als àtoms de H i de He^+ . Donar el quocient $\tau(\text{H})/\tau(\text{He}^+)$. (1.5p)

4.-

- a) Considerar un estat $\pi_g^2 : ^3\Sigma_g^-$ de caràcter covalent a una molècula diatòmica homonuclear. Utilitzant orbitals hidrogenoides $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$ de la capa $n = 2$ donar una funció de prova físicament acceptable. (1.5p)
- b) Caracteritzar el següent espectre molecular, determinant les seves constants característiques i comentar el tipus de transicions (1p)



Temps permès: 3h
Es poden consultar apunts i llibres.

Física Atòmica i Molecular
Febrer 2008

1.-

- a) Considerar l'operador $\sum_{i=1}^N \vec{\ell}_i^2$, on $\vec{\ell}_i$ és el moment angular orbital de l'electró i , i N el nombre d'electrons. Donar el valor esperat d'aquest operador per a l'àtom de Ne en el model de Hartree-Fock. (1p)
- b) Amb el model de Thomas-Fermi donar una estimació de la densitat electrònica $\rho(r)$ quan $r = a_0$ a l'àtom FeI. (1p)

2.- Considerar els estats amb $J = 2$ d'una configuració $d s$. Donar les seves energies en termes de integrals de les parts radials dels orbitals d i s suposant vàlid l'esquema d'acoblament

- a) LS (1.5p)
- b) jj (1.5p)

3.- Trobar el desdoblament del nivell $n = 2$ d'un àtom de hidrogen en presència d'un camp magnètic $B = 50$ kG i d'un camp elèctric $\mathcal{E} = 5 \times 10^5$ V/cm, simultàniament. Menysprear l'estructura fina i considerar els termes d'ordre més baix en B i $\mathcal{E}$ en els casos en que els dos camps siguin:

- a) paral.lels (1p)
- b) perpendiculars (1.5p)

4.-

- a) Considerar un estat de dos electrons $\pi_g^2 : ^3\Sigma_g^-$ de caràcter iònic a una molècula diatòmica homonuclear. Utilitzant orbitals hidrogenoides $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$ de la capa $n = 2$ donar una funció de prova físicament acceptable en cas de ser possible. (1p)
- b) A partir de les energies (en cm^{-1}) de la següent taula parcial de Deslandres trobar la constant harmònica ($\hbar\omega_0$) i la correcció anharmònica ($\beta\hbar\omega_0$) dels dos estats de la transició electrònica. (1.5p)

	$v = 0$	$v = 1$	$v = 2$
$v' = 0$	102137.0	?	?
$v' = 1$	?	99065.0	95394.0
$v' = 2$	103378.0	?	96011.1

Temps permès: 3h

Es poden consultar apunts i llibres.