EXAMEN DE FEBRERO (8-I-2019)

1. (2 pto.) Los operadores correspondientes a las tres componentes del momento angular vienen dados por

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\operatorname{sen}\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$
$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \operatorname{sen}\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

   Demuestre que se cumple

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$$

   si las funciones de estado satisfacen

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta\partial\phi} = \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi\partial\theta}$$

2. (3 pto.) Se propone la siguiente función variacional de prueba para describir el estado fundamental de un oscilador armónico

$$\psi(q) = \begin{cases} C\,(q^2 - A^2) & \text{si } |q| \leq A \\ 0 & \text{si } |q| > A \end{cases}$$

   dónde C es una constante de normalización dada por

$$C = \sqrt{\frac{15}{16\,A^5}}$$

   y A una constante a optimizar.

   - Calcule los valores esperados de los operadores energía cinética y energía potencial.
   - Determine el valor de A que minimiza la integral variacional.
   - Evalue la energía variacional mínima en el sistema de unidades $\hbar = k = \mu = 1$ y determine el error que se comete respecto al valor exacto.

3. (2 pto.) Compruebe que se cumple el principio de incertidumbre de Heisenberg para el estado fundamental de la partícula en la caja de potencial.

4. (1 pto.) Use la siguiente expresión para los niveles de energía vibracionales de una molécula diatómica

$$E_v = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

   para demostrar que la energía de disociación puede calcularse de forma aproximada como

$$D_e = \frac{\omega_e^2}{4\omega_e x_e}$$

5. (2 pto.) La longitud de onda límite de la serie de Balmer de un átomo hidrogenoide es 228 Å. Calcule las posiciones de los nodos de la parte radial del orbital $3s$.

Formulario y constantes físicas

Formulario

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$	$E_n = \frac{h^2 n^2}{8ml^2}$	$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{l}\right)\ ;\ n = 1, 2, ...$
$\hat{l}_z(\phi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$	$\hat{l}_z(\phi)\psi_m(\phi) = m\hbar\,\psi_m(\phi)$	$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\phi}$
$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2MR^2};\quad m = 0, \pm 1, \ldots$	$\hat{H}(\theta,\phi) = \frac{\hat{L}^2(\theta,\phi)}{2I} = \frac{\hat{L}^2(\theta,\phi)}{2mR^2}$	$\hat{L}^2(\theta,\phi) = -\hbar^2\left(\frac{1}{\text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\text{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$
$E_n = -\frac{ke^2}{2a_o}\frac{Z^2}{n^2} = -13.6\,\frac{Z^2}{n^2}\ \text{eV}$	$dV = r^2\,\text{sen}\,\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$	$\hat{L}^2\psi_{l,m_l} = l(l+1)\hbar^2\,\psi_{l,m_l};\quad l = 0, 1, \ldots$
$< r >_{n,l} = \frac{a_o}{2Z}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$		$\cos(\alpha\pm\beta) = \cos\alpha\,\cos\beta \mp \text{sen}\,\alpha\,\text{sen}\,\beta$
$\text{sen}(2\alpha) = 2\ \text{sen}\,\alpha\,\cos\alpha$	$\text{sen}^2\alpha = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\,2\alpha\right)$	$\text{sen}(\alpha\pm\beta) = \text{sen}\,\alpha\,\cos\beta \pm \cos\alpha\,\text{sen}\,\beta$
$\int_0^\infty r^n e^{-br}dr = \frac{n!}{b^{n+1}}$	$\int_t^\infty z^n\,e^{-bz}\,dz = \frac{n!}{b^{n+1}}\,e^{-bt}\left(1 + bt + \frac{(bt)^2}{2!} + \frac{(bt)^3}{3!} + \ldots + \frac{(bt)^n}{n!}\right)$	
$\int_0^\infty xe^{-bx^2}dx = \frac{1}{2b}$	$\int_0^\infty x^2 e^{-bx^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4b^{\frac{3}{2}}}$	$\int_0^\infty x^4 e^{-bx^2}dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{8b^{\frac{5}{2}}}$
$\int x\,\text{sen}(ax)dx = \frac{\text{sen}\,(ax) - ax\cos\,(ax)}{a^2} + C$		
$\int x\,\text{sen}^2(ax)dx = -\frac{1}{8a^2}(2ax\,\text{sen}(2ax) + \cos(2ax) - 2a^2x^2) + C$		
$\int x^2\,\text{sen}(ax)dx = \frac{2ax\sin\,(ax) + (2 - a^2x^2)\cos\,(ax)}{a^3} + C$		
$\int x^2\,\text{sen}^2(ax)dx = -\frac{1}{24a^3}\left((6a^2x^2 - 3)\sin(2ax) + 6ax\cos(2ax) - 4a^3x^3\right) + C$		

Constantes físicas

$R = 8.31$ J mol^{-1} K^{-1}	$R = 1.98$ cal mol^{-1} K^{-1}	$R = 0.082$ atm l mol^{-1} K^{-1}
$h = 6.62608\cdot 10^{-34}$ J s	$m_e = 9.10939\cdot 10^{-31}$ kg	$\epsilon_0 = 8.854\cdot 10^{-12}$ F m^{-1}
$e = 1.602\cdot 10^{-19}$ C	1 atm = $1.013\cdot 10^5$ Pa	1 bar = 10^5 Pa
$a_0 = 5.292\cdot 10^{-11}$ m	$c = 2.9979\cdot 10^8$ m/s	

Factores radiales de los orbitales atómicos
$R_{1s} = 2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o}$
$R_{2s} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a_o}\right) e^{-Zr/2a_o}$
$R_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a_o}$
$R_{3s} = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(1-\frac{2Zr}{3a_o}+\frac{2Z^2r^2}{27a_o^2}\right) e^{-Zr/3a_o}$
$R_{3p} = \frac{8}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}-\frac{Z^2r^2}{6a_o^2}\right) e^{-Zr/3a_o}$

Armónicos esféricos.	$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} S_{l,m}(\theta) e^{im\phi}$ $\int_0^\pi \lvert S_{l,m}\rvert^2 \operatorname{sen}\theta d\theta = 1$
$l = 0:$	$S_{0,0} = \frac{1}{2}\sqrt{2}$
$l = 1:$	$S_{1,0} = \frac{1}{2}\sqrt{6}\cos\theta$
	$S_{1,\pm1} = \frac{1}{2}\sqrt{3}\operatorname{sen}\theta$
$l = 2:$	$S_{2,0} = \frac{1}{4}\sqrt{10}(3\cos^2\theta - 1)$
	$S_{2,\pm1} = \frac{1}{2}\sqrt{15}\operatorname{sen}\theta\cos\theta$
	$S_{2,\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{15}\operatorname{sen}^2\theta$
$l = 3:$	$S_{3,0} = \frac{3}{4}\sqrt{14}(\frac{5}{3}\cos^3\theta - \cos\theta)$
	$S_{3,\pm1} = \frac{1}{8}\sqrt{42}\operatorname{sen}\theta(5\cos^2\theta - 1)$
	$S_{3,\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{105}\operatorname{sen}^2\theta\cos\theta$
	$S_{3,\pm3} = \frac{1}{8}\sqrt{70}\operatorname{sen}^3\theta$

Funciones propias del oscilador armónico ($\alpha = \mu\omega/\hbar$)
$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2/2}$
$\psi_1 = \sqrt{2\alpha}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} xe^{-\alpha x^2/2}$
$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2\alpha x^2 - 1)e^{-\alpha x^2/2}$
$\psi_3 = \sqrt{3}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (\frac{2}{3}\alpha^{3/2}x^3 - \alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$
$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2\alpha^2 x^4 - 6\alpha x^2 + \frac{3}{2})e^{-\alpha x^2/2}$

Ajuste por mínimos cuadrados ($y = ax + b$)	
$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$	$\bar{y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i$
$a = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})^2}$	$b = \bar{y} - a\bar{x}$