EXAMEN DE FEBRERO (7-I-2020)

1. (2.5 pto.) Considere una partícula en un anillo descrita por la siguiente función de estado

$$\psi(\phi) = A \operatorname{sen} \phi$$

donde A es un escalar.

- Discuta si dicha función se comporta bien desde el punto de vista mecanocuántico y determine el valor de la constante A.
- Compruebe si dicha función es función propia de los operadores Hamiltoniano y componente z del momento angular del sistema y, en caso afirmativo, determine sus correspondientes autovalores.
- Calcule la probabilidad de obtener el valor $\hbar$ en una medida de la componente z del momento angular. Calcule así mismo la probabildiad de obtener el valor $2\hbar$.

2. (2.5 pto.) Considere el siguiente armónico esférico

$$Y(\theta, \phi) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos(2\phi)$$

- Demuestre si es función propia del operador momento angular al cuadrado y en caso afirmativo determine el valor del número cuántico l.
- Dibuje aproximadamente su representación polar en los planos xz, yz y xy.

3. (2.5 pto.) Considere un electrón de un átomo hidrogenoide descrito mediante un orbital $1s$.

- Calcule los valores medios de las energías cinéticas y potencial expresando los resultados en función de Z, k, e y a_o.
- Calcule la probabilidad de encontrar el electrón a distancias mayores que el valor medio de r.

4. (2.5 pto.) En el espectro de microondas del estado vibracional fundamental de la molécula de CO se observan las siguientes líneas espectrales

$J \rightarrow J'$	$0 \rightarrow 1$	$1 \rightarrow 2$	$2 \rightarrow 3$	$3 \rightarrow 4$	$4 \rightarrow 5$
ν (MHz)	115271.20	230537.97	345795.90	461040.70	576267.80

Además se observa que la transición $J = 0 \rightarrow 1$ del estado vibracional $v = 1$ ocurre a 114221.2 MHz. Determine los valores de B_e y $D_{e,r}$ (en MHz) y el de r_e (en Å).

Formulario y constantes físicas

Formulario

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$	$E_n = \frac{h^2 n^2}{8ml^2}$	$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{l}\right)\ ;\ n = 1, 2, ...$
$\hat{l}_z(\phi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$	$\hat{l}_z(\phi)\psi_m(\phi) = m\hbar\,\psi_m(\phi)$	$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\phi}$
$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2MR^2};\quad m = 0, \pm1, \ldots$	$\hat{H}(\theta,\phi) = \frac{\hat{L}^2(\theta,\phi)}{2I} = \frac{\hat{L}^2(\theta,\phi)}{2mR^2}$	$\hat{L}^2(\theta,\phi) = -\hbar^2\left(\frac{1}{\text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\text{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$
$E_n = -\frac{ke^2}{2a_o}\frac{Z^2}{n^2} = -13.6\ \frac{Z^2}{n^2}\ \text{eV}$	$dV = r^2\,\text{sen}\,\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$	$\hat{L}^2\psi_{l,m_l} = l(l+1)\hbar^2\ \psi_{l,m_l};\quad l = 0, 1, \ldots$
$< r >_{n,l} = \frac{a_o}{2Z}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$		$\cos(\alpha\pm\beta) = \cos\alpha\ \cos\beta \mp \text{sen}\,\alpha\,\text{sen}\,\beta$
$\text{sen}(2\alpha) = 2\ \text{sen}\,\alpha\ \cos\alpha$	$\text{sen}^2\,\alpha = \frac{1}{2}\,(1 - \cos\ 2\alpha)$	$\text{sen}(\alpha\pm\beta) = \text{sen}\,\alpha\ \cos\beta \pm \cos\alpha\ \text{sen}\,\beta$
$\int_0^\infty r^n e^{-br}dr = \frac{n!}{b^{n+1}}$	$\int_t^\infty z^n\,e^{-bz}\,dz = \frac{n!}{b^{n+1}}\,e^{-bt}\left(1 + bt + \frac{(bt)^2}{2!} + \frac{(bt)^3}{3!} + \ldots + \frac{(bt)^n}{n!}\right)$	
$\int_0^\infty xe^{-bx^2}dx = \frac{1}{2b}$	$\int_0^\infty x^2e^{-bx^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4b^{\frac{3}{2}}}$	$\int_0^\infty x^4e^{-bx^2}dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{8b^{\frac{5}{2}}}$

$$\int x\,\text{sen}(ax)dx = \frac{\text{sen}\,(ax) - ax\cos\,(ax)}{a^2} + C$$

$$\int x\,\text{sen}^2(ax)dx = -\frac{1}{8a^2}(2ax\,\text{sen}(2ax) + \cos(2ax) - 2a^2x^2) + C$$

$$\int x^2\,\text{sen}(ax)dx = \frac{2ax\sin\,(ax) + (2 - a^2x^2)\cos\,(ax)}{a^3} + C$$

$$\int x^2\,\text{sen}^2(ax)dx = -\frac{1}{24a^3}\left((6a^2x^2 - 3)\sin(2ax) + 6ax\cos(2ax) - 4a^3x^3\right) + C$$

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}
$h = 6.62608\cdot10^{-34}$ J s	$m_e = 9.10939\cdot10^{-31}$ kg	$\epsilon_0 = 8.854\cdot10^{-12}$ F m^{-1}
$e = 1.602\cdot10^{-19}$ C	1 atm $= 1.013\cdot10^5$ Pa	1 bar = 10^5 Pa
$a_0 = 5.292\cdot10^{-11}$ m	$c = 2.9979\cdot10^8$ m/s	1 uma = 1.66$\cdot10^{-27}$ kg

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

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