



EXAMEN DE JUNIO (23-VI-2020)

1. (2.5 pts.) Considere una partícula de masa m en una caja de potencial definida entre $x = 0$ y $x = L$ descrita por la siguiente función de estado

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \left(1 + 2 \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right)$$

Calcule la probabilidad de obtener el valor $\frac{h^2}{8mL^2}$ en una medida de la energía.

2. (2.5 pts.) Considere un electrón de un átomo hidrogenoide descrito mediante un orbital $2p$. Calcule la probabilidad de encontrar al electrón a distancias intermedias entre el máximo de la función de distribución radial y el valor medio de r .

3. (2.5 pts.) Se propone la función

$$\psi(q) = e^{-cq^2/2}$$

dónde $q = r - r_e$ para describir el estado fundamental de un oscilador armónico. Calcule el valor del parámetro c que minimiza la integral variacional. (**Nota:** En el formulario del examen se ha añadido alguna ecuación adicional respecto al de la página web que resulta necesaria para solventar este ejercicio)

4. (2.5 pts.) En el espectro de microondas de la banda vibracional fundamental de la molécula de NO se observan las siguientes líneas en la rama R

$J \rightarrow J'$	$0 \rightarrow 1$	$1 \rightarrow 2$	$2 \rightarrow 3$	$3 \rightarrow 4$	$4 \rightarrow 5$	$5 \rightarrow 6$	$6 \rightarrow 7$
ν (cm ⁻¹)	1907.08	1909.95	1912.83	1915.70	1918.58	1921.45	1924.32

Determine los valores de ω_e y B_e (en cm⁻¹) y el de r_e (en Å) asumiendo que la molécula se puede describir mediante los modelos del oscilador armónico/rotor rígido y sabiendo que $m_N = 14$ uma y $m_O = 16$ uma.

FORMULARIO Y CONSTANTES FÍSICAS

Formulario

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$	$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8m l^2}$	$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) ; n = 1, 2, \dots$
$\hat{l}_z(\phi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$	$\hat{l}_z(\phi)\psi_m(\phi) = m\hbar \psi_m(\phi)$	$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$
$E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2MR^2}; m = 0, \pm 1, \dots$	$\hat{H}(\theta, \phi) = \frac{\hat{L}^2(\theta, \phi)}{2I} = \frac{\hat{L}^2(\theta, \phi)}{2mR^2}$	$\hat{L}^2(\theta, \phi) = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$
$E_n = -\frac{ke^2 Z^2}{2a_0 n^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$	$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$	$\hat{L}^2 \psi_{l, m_l} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{l, m_l}; l = 0, 1, \dots$
$\langle r \rangle_{n, l} = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)]$		$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta$
$\sin(2\alpha) = 2 \sin \alpha \cos \alpha$	$\sin^2 \alpha = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\alpha)$	$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta$
$\int_0^\infty r^n e^{-br} dr = \frac{n!}{b^{n+1}}$	$\int_t^\infty z^n e^{-bz} dz = \frac{n!}{b^{n+1}} e^{-bt} \left(1 + bt + \frac{(bt)^2}{2!} + \frac{(bt)^3}{3!} + \dots + \frac{(bt)^n}{n!} \right)$	
$\int_0^\infty e^{-bx^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{b}}$	$\int_0^\infty x e^{-bx^2} dx = \frac{1}{2b}$	$\int_0^\infty x^2 e^{-bx^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4b^{\frac{3}{2}}}$
$\int_0^\infty x^4 e^{-bx^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{8b^{\frac{5}{2}}}$	$\int x \sin(ax) dx = \frac{\sin(ax) - ax \cos(ax)}{a^2} + C$	
$\int x \sin^2(ax) dx = -\frac{1}{8a^2} (2ax \sin(2ax) + \cos(2ax) - 2a^2 x^2) + C$		
$\int x^2 \sin(ax) dx = \frac{2ax \sin(ax) + (2 - a^2 x^2) \cos(ax)}{a^3} + C$		
$\int x^2 \sin^2(ax) dx = -\frac{1}{24a^3} ((6a^2 x^2 - 3) \sin(2ax) + 6ax \cos(2ax) - 4a^3 x^3) + C$		

Constantes físicas

$R = 8.31 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	$R = 1.98 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	$R = 0.082 \text{ atm l mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
$h = 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	$m_e = 9.10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	$\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$1 \text{ atm} = 1.013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$	$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$
$a_0 = 5.292 \cdot 10^{-11} \text{ m}$	$c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}$	$1 \text{ uma} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Factores radiales de los orbitales atómicos

$$R_{1s} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{2s} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{3s} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2Z^2r^2}{27a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{3p} = \frac{8}{27\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} - \frac{Z^2r^2}{6a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

Armónicos esféricos. $Y_{l,m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} S_{l,m}(\theta) e^{im\phi}$
 $\int_0^\pi |S_{l,m}|^2 \sin \theta d\theta = 1$

$$l = 0 : \quad S_{0,0} = \frac{1}{2}\sqrt{2}$$

$$l = 1 : \quad S_{1,0} = \frac{1}{2}\sqrt{6} \cos \theta$$

$$S_{1,\pm 1} = \frac{1}{2}\sqrt{3} \sin \theta$$

$$l = 2 : \quad S_{2,0} = \frac{1}{4}\sqrt{10}(3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$S_{2,\pm 1} = \frac{1}{2}\sqrt{15} \sin \theta \cos \theta$$

$$S_{2,\pm 2} = \frac{1}{4}\sqrt{15} \sin^2 \theta$$

$$l = 3 : \quad S_{3,0} = \frac{3}{4}\sqrt{14} \left(\frac{5}{3} \cos^3 \theta - \cos \theta \right)$$

$$S_{3,\pm 1} = \frac{1}{8}\sqrt{42} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$$

$$S_{3,\pm 2} = \frac{1}{4}\sqrt{105} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$S_{3,\pm 3} = \frac{1}{8}\sqrt{70} \sin^3 \theta$$

Funciones propias del oscilador armónico ($\alpha = \mu\omega/\hbar$)

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_1 = \sqrt{2\alpha} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_3 = \sqrt{3} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{2}{3}\alpha^{3/2} x^3 - \alpha^{1/2} x \right) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \left(2\alpha^2 x^4 - 6\alpha x^2 + \frac{3}{2} \right) e^{-\alpha x^2/2}$$

Ajuste por mínimos cuadrados ($y = ax + b$)

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$$
$$a = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad b = \bar{y} - a\bar{x}$$
