EXAMEN DE FEBRERO (11-I-2021)

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

$$\psi(x) = Ax^2 + Bx + C$$

donde A, B y C son constantes.

- Calcule los valores de A, B y C para que la función sea mecanocuánticamente aceptable.
- Calcule la probabilidad de que al medir la energía se obtenga el valor $\frac{h^2}{8mL^2}$.

2. (2.5 pto.) Considere un electrón de un átomo hidrogenoide descrito mediante un orbital $2p_1$.

- Calcule los valores medios de las energías cinética y potencial expresando los resultados en función de Z, k, e y a_o.
- Calcule la probabilidad de encontrar al electrón a distancias comprendidas entre el máximo de la función de distribución radial y el punto de retorno clásico.

3. (2.5 pto.) Se propone la siguiente función para describir el estado fundamental de un oscilador armónico

$$\phi(q) = e^{-b\,q^2}$$

dónde $q = r - r_e$ y b es una constante. Determine el valor de b que minimiza la integral variacional.

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

$J \to J'$	$0 \to 1$	$1 \to 2$	$2 \to 3$	$3 \to 4$	$4 \to 5$	$5 \to 6$	$6 \to 7$
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 molecula 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

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

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

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

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

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	1 uma = 1.66$\cdot 10^{-27}$ 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 ($y = ax + b$)	
$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$	$\bar{y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i$
$a = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})^2}$	$b = \bar{y} - a\bar{x}$