



EXAMEN DE JULIO (13-VII-2021)

1. (2.5 pts.) Un electrón de un átomo hidrogenoide está descrito por la siguiente función de estado

$$\Psi(r, \theta, \phi) = N (\phi_{1s} + 2i \phi_{2p_0})$$

donde ϕ_{1s} y ϕ_{2p_0} son los correspondientes orbitales atómicos.

- Calcule N para que la función esté normalizada.
 - Calcule el valor medio del operador momento angular al cuadrado.
 - Calcule el valor medio de la distancia del electrón al núcleo.
2. (2.5 pts.) Sabiendo que el radio covalente del átomo de Helio vale 46 pm
- Calcule la carga nuclear efectiva para los electrones del átomo de helio.
 - Calcule el valor del potencial de ionización del helio correspondiente al proceso



y su error respecto al valor experimental de 2370 kJ/mol.

3. (2.5 pts.) Utilice el teorema de variaciones lineal para obtener las energías variacionales aproximadas del operador

$$\hat{H}(x) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2}_{\hat{H}_{\text{ar}}} + k_1 x$$

utilizando como funciones de base las funciones armónicas del operador \hat{H}_{ar} correspondientes a $v = 0$ y $v = 1$. Expresar los resultados en función de h , ν , k_1 y α .

4. (2.5 pts.) En el espectro de la banda vibracional fundamental de la molécula de H_2 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)	4499.6	4599.4	4755.2	4879.7	4966.4	5182.0	5251.5

- Determine los valores de ω_e y B_e (en cm⁻¹) asumiendo que la molécula se puede describir mediante los modelos del oscilador armónico/rotor rígido.
- Calcule la frecuencia aproximada a la que aparecerá la transición $0 \rightarrow 1$ de la rama R de la molécula de deuterio asumiendo que la masa del deuterio es el doble que la del hidrógeno y que ambas moléculas tienen idénticas constantes de fuerza y distancias internucleares de equilibrio.

FORMULARIO Y CONSTANTES FÍSICAS

Formulario

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

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 ($y = ax + b$)

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