UNIVERSIDAD DE MURCIA

Química Física I

Grado en Química

EXAMEN DE FEBRERO (16-XII-2022)

1. (2.5 pto.) Considere un electrón de un átomo de Hidrógeno descrito mediante la siguiente función de estado
$$\psi = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\phi_{1s} + 2i\,\phi_{2s}\right)$$
donde ϕ_{1s} y ϕ_{2s} son orbitales atómicos.
   - Calcule el valor medio de la distancia del electrón al núcleo.
   - Calcule la probabilidad de encontrar al electrón en la zona del espacio definida por $y > 0$
   - Calcule $\Delta\hat{L}_z$.

2. (2.5 pto.) Se propone la siguiente función
$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < -L \\ A\cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) & \text{si} \quad |x| \leq L \\ 0 & \text{si} \quad x > L \end{cases}$$
donde A y L son constantes para describir un oscilador armónico de masa μ y constante de fuerza k.
   - Calcule el valor de A para que la función esté normalizada.
   - Calcule el valor de L que minimiza el valor medio de la energía.

3. (2.5 pto.) El valor experimental del primer potencial de ionización del átomo de helio vale 2370 kJ/mol.
   - Calcule el valor del segundo potencial de ionización (en kJ/mol).
   - Calcule la carga nuclear efectiva para los electrones del átomo de helio.
   - Calcule el valor del radio covalente del átomo de helio (en Å).

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

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

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

FORMULARIO Y CONSTANTES FÍSICAS

Formulario

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

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

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

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

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