



EXAMEN DE JUNIO (17-V-2023)

Apellidos:	Firma
Nombre:	
DNI:	

El/la alumno/a de la asignatura Química Física I del tercer curso del Grado en Química solicita mantener las calificaciones obtenidas durante el curso en las siguientes actividades y con la valoración respecto a la nota total indicada:

	Sí	No
Tutorías (25 %)		

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

$$\psi(\phi) = A \sin(2\phi)$$

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 .
 - Calcule Δl_z
 - Calcule la probabilidad de obtener el valor $2\hbar$ en una medida de la componente z del momento angular.
2. (2.5 pto.) Considere un electrón de un átomo hidrogenoide descrito mediante el orbital $2p$.
- Calcule la máxima distancia a la que se puede situar el electrón del núcleo clásicamente expresada en función de a_0 y Z .
 - Calcule la posición del máximo de la función de distribución radial expresada en función de a_0 y Z .
 - Calcule la probabilidad de encontrar al electrón entre las distancias de los dos apartados anteriores.
3. (2.5 pto.) Se propone la siguiente función variacional de prueba para describir el estado fundamental de un oscilador armónico

$$\psi(q) = \begin{cases} C(q^2 - A^2) & \text{si } |q| \leq A \\ 0 & \text{si } |q| > A \end{cases}$$

dónde C es una constante de normalización dada por

$$C = \sqrt{\frac{15}{16A^5}}$$

y A una constante a optimizar.

- Calcule los valores esperados de los operadores energía cinética y energía potencial.
 - Determine el valor de A que minimiza la integral variacional.
 - Evalúe la energía variacional mínima en el sistema de unidades $\hbar = k = \mu = 1$ y determine el error que se comete respecto al valor exacto.
4. (2.5 pts.) Calcule el valor de D_e (en cm^{-1}) de la molécula HCl usando los valores de las siguientes transiciones vibracionales

$v \rightarrow v'$	$0 \rightarrow 1$	$0 \rightarrow 2$	$0 \rightarrow 3$	$0 \rightarrow 4$
$\tilde{\nu} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	2885.90	5668.05	8346.98	10923.11

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 ($y = ax + b$)

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