

**EXAMEN DE JUNIO (20-V-2026)**

|            |       |
|------------|-------|
| 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 %) |    |    |

- Una partícula se encuentra en el primer estado excitado de una caja de potencial.
  - (1.25 pto.) Calcule la probabilidad de encontrar a la partícula entre los dos máximos de la función de densidad de probabilidad.
  - (1.25 pto) Demuestre que  $\langle \hat{x} \hat{p} \rangle \neq \langle \hat{x} \rangle \cdot \langle \hat{p} \rangle$
- (2.5 pto.) Sabiendo que el primer potencial de ionización del átomo de Helio vale 24.587 eV calcule la posición del punto de retorno clásico y la incertidumbre en la distancia electrón-núcleo expresadas en función de  $a_0$ .
- Considere que se describe la vibración de una molécula de oxígeno mediante un oscilador armónico siendo  $\omega_e = 1580.2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $m_O = 16 \text{ uma}$  y  $r_e = 1.21 \text{ Å}$ . Calcule para el primer estado excitado:
  - (1 pto) En que valores de la distancia internuclear ( $r$ ) se encuentran los puntos de retorno clásico (en Å).
  - (1 pto) El valor de  $\Delta q$  (en Å) siendo  $q = r - r_e$ .
  - (0.5 pto) Los valores de la distancia internuclear en que aparecen los máximos de la densidad de probabilidad (en Å).
- (2.5 pto.) La molécula de CO ( $m_C = 12.04 \text{ uma}$ ,  $m_O = 15.999 \text{ uma}$ ) tiene una constante de fuerza armónica de 1902.7 N/m y una distancia internuclear de equilibrio de 1.128 Å. Sabiendo que para el estado vibracional fundamental el origen de banda se encuentra en 2143  $\text{cm}^{-1}$  y que las dos primeras líneas de la rama R aparecen a 115271.20 MHz y 230537.97 MHz calcule los valores de  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $D_{e,r}$  y  $\alpha_e$  en  $\text{cm}^{-1}$ .

# FORMULARIO Y CONSTANTES FÍSICAS

## Formulario

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

## 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 ( $\alpha = \mu\omega/\hbar$ )

---

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

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

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

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

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

---

---

---

---

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

---

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

---

---