

Soluciones:

1. El oído humano es sensible a ondas sonoras con frecuencias comprendidas entre 15 Hz y 20 kHz. La velocidad del sonido en el aire es 343 m/s. Calcular las longitudes de onda correspondientes a estas frecuencias.

Solución:

$$\lambda_1 = \frac{v}{\nu_1} = \frac{343 \text{ m/s}}{15 \text{ Hz}} = 22.87 \text{ m (audio frecuencias)}$$

$$\lambda_2 = \frac{v}{\nu_2} = \frac{343 \text{ m/s}}{20000 \text{ Hz}} = 0.01715 \text{ m (audio frecuencias)}$$

2. La línea más intensa del espectro del átomo de sodio tiene una longitud de onda de 589 nm. Calcular el correspondiente número de onda y la energía de la transición implicada en electronvoltios por fotón, y en kJ/mol.

Solución:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{589 \text{ nm}} \times \frac{1 \text{ nm}}{10^{-9} \text{ m}} = 1.6977 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$$

$$\Delta E = h\nu = h c \tilde{\nu} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s} \times 1.6977 \times 10^6 \text{ m}^{-1} = 3.372 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{o en eV} \quad \Delta E = 3.372 \times 10^{-19} \text{ J} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 2.105 \text{ eV}$$

$$\text{y en kJ/mol} \quad \Delta E = 3.373 \times 10^{-19} \text{ J} \times 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 2.032 \times 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 203.2 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

3. Calcular la longitud de onda máxima de un fotón que pueda producir la reacción:



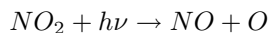
Solución:

$$\Delta H = 225 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \times \frac{1}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \times \frac{4.184 \text{ J}}{1 \text{ cal}} = 1.563 \times 10^{-18} \text{ J}$$

que corresponde con la energía de un fotón capaz de producir la reacción:

$$\Delta H = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta H} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{1.563 \times 10^{-18} \text{ J}} = 1.271 \times 10^{-7} \text{ m} = 127.1 \text{ nm (IR)}$$

4. La reacción fotoquímica



es una de las fuentes de átomos de oxígeno (y por tanto de ozono) más importante en la atmósfera terrestre. La energía de disociación es 306 kJ/mol. Encontrar la longitud de onda de un fotón capaz de producir dicha reacción.

Solución:

$$\Delta H = 306 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \times \frac{1}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 5.081 \times 10^{-22} \text{ kJ} = 5.081 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta H} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{5.081 \times 10^{-19} \text{ J}} = 3.910 \times 10^{-7} \text{ m} = 391.0 \text{ nm (UV)}$$



5. La frecuencia umbral para la emisión fotoeléctrica del cobre es $1.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$. ¿Cuál será la energía máxima (en electronvoltios) de los fotoelectrones emitidos cuando la luz de frecuencia $1.5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ incide sobre una superficie de cobre?

Solución:

De acuerdo con el principio de conservación de la energía $h\nu = \phi_0 + T$, donde ϕ_0 es la energía mínima necesaria para arrancar un electrón y T su energía cinética máxima.

La frecuencia umbral es ($T = 0$) $h\nu_0 = \phi_0$, que nos permite reescribir la conservación de la energía: $h\nu = h\nu_0 + T$. De donde

$$T = h(\nu - \nu_0) = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times (1.5 - 1.1) \times 10^{15} \text{ Hz} = 2.6504 \times 10^{-19} \text{ J} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 1.6542 \text{ eV}$$

6. El potencial de extracción del sodio es 2.3 eV: a) ¿cuál será la máxima longitud de onda de la luz, que producirá emisión de fotoelectrones en el sodio? y b) ¿cuál será la energía cinética máxima de los fotoelectrones si luz de 2000 Å incide sobre una superficie de sodio?

Solución:

$$\begin{aligned} \text{(a) } \phi_0 = h\nu_0 = h \frac{c}{\lambda_0} \rightarrow \lambda_0 &= \frac{hc}{\phi_0} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{2.3 \text{ eV}} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} \\ &= 5.391 \times 10^{-7} \text{ m} \times \frac{1 \text{ \AA}}{10^{-10} \text{ m}} = 5391 \text{ \AA} = 539.1 \text{ nm (UV)} \end{aligned}$$

y que corresponde con luz visible-ultravioleta.

$$\text{(b) Si } \lambda = 2000 \text{ \AA} \rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{2000 \text{ \AA}} \times \frac{1 \text{ \AA}}{10^{-10} \text{ m}} = 1.499 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

$$\begin{aligned} T = h\nu - \phi_0 &= 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 1.499 \times 10^{15} \text{ Hz} - 2.3 \text{ eV} \times \frac{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} \\ &= (9.932 - 3.685) \times 10^{-19} \text{ J} = 6.247 \times 10^{-19} \text{ J} \end{aligned}$$

7. La función trabajo del K es 2.2 eV y la del Ni 5.0 eV. (a) Calcular las frecuencias y longitudes de onda umbral para estos dos metales. (b) ¿Dará lugar la luz ultravioleta de longitud de onda 400 nm al efecto fotoeléctrico en el K? ¿Y en el Ni? (c) Calcular la máxima energía cinética de los electrones emitidos en (b).

Solución:

$$\text{(a) } \nu_0(K) = \frac{\phi_0(K)}{h} = \frac{2.2 \text{ eV}}{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}} \times \frac{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} = 5.320 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\begin{aligned} \lambda_0(K) &= \frac{hc}{\phi_0(K)} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{2.2 \text{ eV}} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 5.636 \times 10^{-7} \text{ m} \\ &= 5.636 \times 10^{-7} \text{ m} \times \frac{\text{nm}}{10^{-9} \text{ m}} = 563.6 \text{ nm} \end{aligned}$$

Análogamente, para el Níquel

$$\nu_0(Ni) = \frac{\phi_0(Ni)}{h} = \frac{5.0 \text{ eV}}{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}} \times \frac{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} = 1.209 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

$$\lambda_0(Ni) = \frac{hc}{\phi_0(Ni)} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{5.0 \text{ eV}} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 2.480 \times 10^{-7} \text{ m}$$



$$= 2.480 \times 10^{-7} \text{ m} \times \frac{1 \text{ nm}}{10^{-9} \text{ m}} = 248.0 \text{ nm}$$

(b) Si $\lambda = 400 \text{ nm} < \lambda_0$, si se dará el efecto fotoeléctrico, mientras que si $\lambda = 400 \text{ nm} > \lambda_0$, no se dará. Por tanto, en el K sí y en el Ni no.

$$(c) \text{ Si } \lambda = 400 \text{ nm} \rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{400 \text{ nm}} \times \frac{\text{nm}}{10^{-9} \text{ m}} = 7.495 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\text{y } T = h(\nu - \nu_0) = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times (7.495 \times 10^{14} - 5.320 \times 10^{14}) \text{ Hz} = 1.441 \times 10^{-19} \text{ J}$$

8. Cuando se ilumina una cierta superficie metálica con luz de diferentes longitudes de onda y se miden los potenciales que detienen los fotoelectrones, se obtienen los valores que se muestran en la siguiente tabla:

$\lambda(10^{-7} \text{ m})$	3.66	4.05	4.36	4.92	5.46	5.79
V(V)	1.48	1.15	0.93	0.62	0.36	0.24

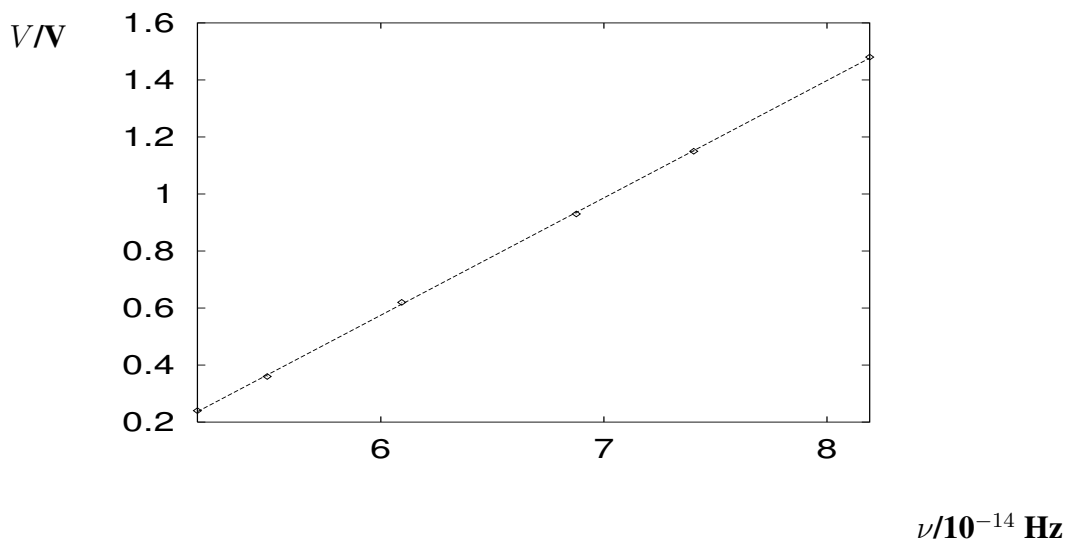
Representando el potencial en función de la frecuencia, determinar: (a) la frecuencia umbral, (b) el potencial de extracción del metal, y (c) la constante de Planck.

Solución:

Representando el potencial en función de la frecuencia, tenemos que: $V = \frac{h}{e}\nu - \frac{\phi_0}{e}$

Si calculamos las frecuencias $\nu = \frac{c}{\lambda}$

$\nu(10^{14} \text{ Hz})$	8.191	7.402	6.876	6.093	5.491	5.178
V(V)	1.48	1.15	0.93	0.62	0.36	0.24



Un ajuste por mínimos cuadrados da

$$V/V = 4.11518 \times 10^{-15} \nu / \text{Hz} - 1.89410$$

de donde se deduce que



$$(a) \nu_0 = \frac{1.89410}{4.11518 \times 10^{-15}} \text{ Hz} = 4.602 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$(b) \frac{h}{e} = 4.11518 \times 10^{-15} \frac{\text{V}}{\text{Hz}} \rightarrow h = 4.11518 \times 10^{-15} \frac{\text{V}}{\text{Hz}} \times 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C} = 6.593 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

que permite determinar h con un error del

$$\%error = \frac{\bar{h} - h}{\bar{h}} \times 100 = 0.5 \%$$

(c) Análogamente $\frac{\phi_0}{e} = 1.89410 \text{ V} \rightarrow \phi_0 = 1.89410 \text{ eV}$.

9. Cuando cierto metal se irradia con luz de frecuencia $3.0 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$, los fotoelectrones emitidos tienen una energía cinética doce veces mayor que los fotoelectrones emitidos cuando el mismo metal se irradia con luz de frecuencia $2.0 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$. ¿Cuál será la frecuencia umbral del metal?.

Solución:

$$\nu_1 = 3.0 \times 10^{16} \text{ Hz} \rightarrow T_1 = 12T_2$$

$$\nu_2 = 2.0 \times 10^{16} \text{ Hz} \rightarrow T_2$$

Como $h\nu_1 = T + \phi_0 = T + h\nu_0$, tenemos un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas

$$h\nu_1 = T_1 + h\nu_0 \rightarrow h\nu_1 = 12T_2 + h\nu_0$$

$$h\nu_2 = T_2 + h\nu_0 \rightarrow 12 \times (h\nu_2 = T_2 + h\nu_0)$$

por lo que restándolas

$$h(12\nu_2 - \nu_1) = 11h\nu_0 \rightarrow \nu_0 = \frac{12\nu_2 - \nu_1}{11} = 1.909 \times 10^{16} \text{ Hz}$$

10. En un tubo de rayos X donde los electrones se aceleran con un potencial de 5000 V, la mínima longitud de onda de los rayos X producidos es 248 pm. Estimad el valor de la constante de Planck.

Solución:

En este caso la energía cinética de los electrones es igual a la energía de los rayos X,

$$eV = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \rightarrow h = \frac{\lambda eV}{c} = \frac{248 \text{ pm} \times 5000 \text{ eV}}{2.998 \times 10^8 \text{ m/s}} \times \frac{10^{-12} \text{ m}}{1 \text{ pm}} \times \frac{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} = 6.627 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

11. Calcular la frecuencia hacia la cual convergen todas las líneas espectrales de la serie de Lyman. ¿Cuál será la longitud de onda y la energía de esta radiación?.

Solución:

El número de onda de las líneas de la serie de Lyman viene dada por

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_2 > n_1$$

con $n_1 = 1$, $R_H = 109677.5856 \text{ cm}^{-1}$ (constante de Rydberg para el hidrógeno). La frecuencia a la cual convergen todas las líneas se obtiene cuando $n_2 = \infty$:

$$\tilde{\nu} = R_H = 109677.5856 \text{ cm}^{-1}$$



La frecuencia será $\nu = c\tilde{\nu} = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s} \times 109677.5856 \text{ cm}^{-1} \times 100 \text{ cm/1 m} = 3.2881 \times 10^{15} \text{ Hz}$.

La longitud de onda es el inverso del número de onda

$$\lambda = \frac{1}{\tilde{\nu}} = \frac{1}{109677.5856 \text{ cm}^{-1}} = 9.118 \times 10^{-6} \text{ cm} \times \frac{1 \text{ m}}{100 \text{ cm}} \times \frac{1 \text{ nm}}{10^{-9} \text{ m}} = 91.18 \text{ nm}$$

y la energía de la transición:

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s} \times 109677.5856 \text{ cm}^{-1} \times \frac{100 \text{ cm}}{1 \text{ m}} = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$$

12. Calcular la longitud de onda en Angstrom y la frecuencia en s^{-1} de la primera línea de la serie de Balmer.

Solución:

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_2 > n_1$$

con $n_1 = 2$ y $n_2 = 3$.

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) = R_H \frac{5}{36}$$

$$\lambda = \frac{1}{\tilde{\nu}} = \frac{36}{5R_H} = \frac{36}{5 \times 109677.5856 \text{ cm}^{-1}} = 6.565 \times 10^{-5} \text{ cm} = 656.5 \text{ nm} = 6565 \text{ \AA}$$

$$\nu = c\tilde{\nu} = \frac{5}{36} cR_H = \frac{5}{36} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s} \times 109677.5856 \text{ cm}^{-1} \times \frac{100 \text{ cm}}{1 \text{ m}} = 4.567 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

13. Calcular el potencial de ionización del átomo de hidrógeno cuando el electrón ocupa la órbita con número cuántico principal igual a 5.

Solución:

En este caso $n_1 = 5$ y $n_2 = \infty$:

$$\begin{aligned} \tilde{\nu} = R_H \frac{1}{5^2} \rightarrow E = h\nu = hc\tilde{\nu} &= \frac{hcR_H}{25} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s} \times 109677.5856 \text{ cm}^{-1}}{25} \times \frac{100 \text{ cm}}{1 \text{ m}} \\ &= 8.715 \times 10^{-20} \text{ J} = 8.715 \times 10^{-20} \text{ J} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 0.5439 \text{ eV} \end{aligned}$$

14. Calcular la longitud de onda de De Broglie asociada a:

(a) un electrón con 15 keV de energía cinética, (b) un protón con 15 keV de energía cinética, (c) una molécula de SF_6 a una velocidad de 1 m/s, y (d) un objeto de 1 kg a una velocidad de 1 m/s.

Solución:

$$(a) T = 15 \text{ keV} = \frac{p^2}{2m_e} \rightarrow p = \sqrt{2m_e T} = \sqrt{2 \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 15000 \text{ eV} \times 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C/e}}$$

$$= 6.616 \times 10^{-23} \text{ kg m/s} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{6.616 \times 10^{-23} \text{ kg m/s}} = 1.0001 \times 10^{-11} \text{ m} = 0.01001 \text{ nm}$$

$$(b) \text{ Análogamente } p = \sqrt{2m_p T} = \sqrt{2 \times 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg} \times 15000 \text{ eV} \times 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C/e}}$$

$$= 2.836 \times 10^{-21} \text{ kg m/s} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2.836 \times 10^{-21} \text{ kg m/s}} = 2.3369 \times 10^{-13} \text{ m} = 0.23369 \text{ pm}$$



$$(c) PM_{SF_6} = A_S + 6A_F = 146.0544 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \rightarrow m(SF_6) = \frac{146.0544 \text{ g/mol}}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 2.425 \times 10^{-22} \text{ g} \rightarrow$$

$$p = mv = 2.425 \times 10^{-25} \text{ kg m/s} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = 2.7325 \times 10^{-9} \text{ m} = 2.7325 \text{ nm}$$

$$(d) p = mv = 1 \text{ kg m/s} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ m} = 6.626 \times 10^{-25} \text{ nm}$$

15. Calcular el módulo de (a) -2 , (b) $3 - 2i$, (c) $\cos \theta + i \operatorname{sen} \theta$, (d) $y \exp(iax)$.

Solución:

$$(a) |-2| = \sqrt{(-2)^2 + 0^2} = 2,$$

$$(b) |3 - 2i| = \sqrt{(3 + 2i) \times (3 - 2i)} = \sqrt{3^2 + 2^2} = \sqrt{13},$$

$$(c) |\cos \theta + i \operatorname{sen} \theta| = \sqrt{(\cos \theta - i \operatorname{sen} \theta) \times (\cos \theta + i \operatorname{sen} \theta)} = \sqrt{\cos^2 \theta + \operatorname{sen}^2 \theta} = 1,$$

$$(d) |y \exp(iax)| = \sqrt{y \exp(-iax) \times y \exp(iax)} = |y|.$$

16. Probar que $(fg)^* = f^*g^*$ donde f y g son cantidades complejas.

Solución: Sea $f = a+bi$ y $g = c+di$ con a, b, c, d reales, entonces $(fg)^* = [(a+bi)(c+di)]^* = [(ac-bd) + (ad+bc)i]^* = (ac-bd) - (ad+bc)i$ y $f^*g^* = (a-bi)^*(c-di) = (a-bi)(c-di) = (ac-bd) - (ad+bc)i$.

17. Verificar que si Ψ es una solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, entonces $c\Psi$ es también solución siendo c una constante.

Solución: Si Ψ es solución de $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$, entonces $c\Psi$ también, ya que se cumple $i\hbar \partial c\Psi / \partial t = \hat{H} c\Psi$.

18. Comprobar que las funciones $\Psi(x, t) = A \exp[2\pi i(\pm x/\lambda - \nu t)]$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger monodimensional dependiente del tiempo de una partícula libre. Suponiendo que λ es la longitud de onda de De Broglie, expresar ν en función del momento lineal p .

Solución:

Para una partícula libre la ecuación de Schrödinger monodimensional dependiente del tiempo es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Para comprobar que es solución, calcularemos los dos miembros:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A \exp[2\pi i(\pm x/\lambda - \nu t)] = -A 2\pi i^2 \hbar \nu \exp[2\pi i(\pm x/\lambda - \nu t)] = A 2\pi \hbar \nu \exp[2\pi i(\pm x/\lambda - \nu t)]$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} A \exp[2\pi i(\pm x/\lambda - \nu t)] = -A \frac{4\pi^2 i^2 \hbar^2}{\lambda^2} \frac{1}{2m} \exp[2\pi i(\pm x/\lambda - \nu t)]$$

$$\text{que son iguales si } 2\pi \hbar \nu = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{\lambda^2} \frac{1}{2m}, \text{ o sea si } \nu = \frac{2\pi \hbar}{2m\lambda^2}. \text{ Como } \lambda = h/p \rightarrow h\nu = \frac{p^2}{2m}.$$

19. Si la posición de un electrón se mide con una precisión de $\pm 0.001 \text{ \AA}$ ¿Cuál será la máxima precisión para el momento?

Solución:

De acuerdo con el principio de Incertidumbre $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, luego en este caso si $\Delta x = 0.002 \text{ \AA}$

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{1.055 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2 \times 0.002 \times 10^{-10} \text{ m}} = 0.264 \times 10^{-21} \text{ Kg m/s}$$

Si calculamos $\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m} = \frac{0.264 \times 10^{-21} \text{ Kg m/s}}{9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}} = 2.898 \times 10^8 \text{ m/s}$, vemos que en este caso la indeterminación en la velocidad es del orden de la velocidad de la luz.



20. Un átomo sufre una transición desde un estado excitado con un tiempo de vida de 1 ns al estado fundamental, y emite un fotón con una longitud de onda de 600 nm. Calcular la incertidumbre en la energía del estado excitado.

Solución:

De acuerdo con el principio de Incertidumbre $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, luego en este caso

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{1.055 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2 \times 10^{-9} \text{ s}} = 0.528 \times 10^{-25} \text{ J}$$

mientras que la energía con respecto al estado fundamental es de

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{600 \times 10^{-9} \text{ m}} = 3.311 \times 10^{-19} \text{ J}$$

21. Hallar la longitud de onda de la luz emitida cuando una partícula de $1.0 \times 10^{-27} \text{ g}$ en una caja monodimensional de 30 nm pasa del nivel $n = 2$ al nivel $n = 1$.

Solución:

Los niveles de energía de una caja monodimensional son: $E_n = \frac{h^2}{8ma^2}n^2$, que permite obtener la energía de la transición

$$E = E_2 - E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} (2^2 - 1^2) = \frac{3h^2}{8ma^2}$$

de donde se puede obtener la frecuencia de la luz emitida

$$\nu = E/h = \frac{3h}{8ma^2} = \frac{3 \times 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{8 \times 10^{-27} \text{ g} \times (30 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} = 2.761 \times 10^{11} \text{ Hz}$$

$$\text{y la longitud de onda } \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{2.761 \times 10^{11} \text{ Hz}} = 1.086 \times 10^{-3} \text{ m} = 1.086 \text{ mm}$$

22. Calcular la energía en electronvoltios (eV) de los niveles $n = 1, 2$ y 3 de un electrón en una caja de potencial monodimensional de longitud $a = 560 \text{ pm}$.

Solución:

Los niveles de energía de una caja monodimensional son: $E_n = \frac{h^2}{8ma^2}n^2$, que permite obtener la energía de los niveles:

$$E_1 = \frac{h^2}{8m_e a^2} = \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J s})^2}{8 \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (560 \times 10^{-12} \text{ m})^2} = 1.921 \times 10^{-19} \text{ J} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 1.20 \text{ eV}$$

Si expresamos la energía del estado n en función de la energía del estado fundamental $E_n = E_1 n^2$:

$$E_2 = 4E_1 = 4.80 \text{ eV}$$

$$E_3 = 9E_1 = 10.80 \text{ eV}$$

23. Para una partícula en el estado estacionario n de una caja monodimensional de longitud a , encontrar la probabilidad de que la partícula esté en la región $0 \leq x \leq a/4$.

Solución:

$$P(0 \leq x \leq a/4) = \int_0^{a/4} dx \psi_n^*(x) \psi_n(x) = \frac{2}{a} \int_0^{a/4} dx \sin^2 \frac{n\pi x}{a}$$

que se resuelve haciendo la sustitución

$$2 \sin^2 \theta = 1 - \cos(2\theta)$$



$$P(0 \leq x \leq a/4) = \frac{1}{a} \int_0^{a/4} dx \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) = \frac{1}{a} \left(\frac{a}{4} - \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{n\pi}{2} \right) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{n\pi}{2}$$

Nótese que si n es par, $\sin \frac{n\pi}{2} = 0$ y $P(0 \leq x \leq a/4) = \frac{1}{4}$, y si n es impar, se puede expresar como $n = 2l + 1$, con $l = 0, 1, 2, 3, \dots$, de tal forma que $\sin \frac{n\pi}{2} = \sin \frac{(2l+1)\pi}{2} = (-1)^l$. En este caso $P(0 \leq x \leq a/4) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi}$ si $n = 1, 5, \dots$ y $P(0 \leq x \leq a/4) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2n\pi}$ si $n = 3, 7, \dots$

24. Para el estado fundamental de una partícula en una caja monodimensional de longitud a , encontrar la probabilidad de que la partícula esté entre $\pm 0.001a$ del punto $a/2$.

Solución:

$$P(a/2) = \int_{a/2-0.001a}^{a/2+0.001a} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx$$

Como la función de onda casi no varía en dicho intervalo, se puede tomar como constante e igual al valor en $a/2$

$$P(a/2) = \psi_n^*(a/2)\psi_n(a/2) \int_{a/2-0.001a}^{a/2+0.001a} dx = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{2} \times 0.002a$$

Para el estado fundamental $n = 1$

$$P(a/2) = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi}{2} \times 0.002a = 0.004$$

25. Para el estado estacionario de número cuántico n de la partícula en una caja, escribir una expresión para la probabilidad de que la partícula se encuentre entre $a/4$ y $a/2$.

Solución:

$$P(a/4 \leq x \leq a/2) = \int_{a/4}^{a/2} dx \psi_n^*(x)\psi_n(x) = \frac{2}{a} \int_{a/4}^{a/2} dx \sin^2 \frac{n\pi x}{a} = \frac{1}{a} \int_{a/4}^{a/2} dx \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) = \frac{1}{a} \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4} - \frac{a}{2n\pi} \left(\sin n\pi - \sin \frac{n\pi}{2} \right) \right] = \frac{1}{4} + \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{n\pi}{2}$$

26. Para un electrón en una determinada caja monodimensional, la transición observada de menor frecuencia es $2.0 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Calcular la longitud de la caja.

Solución:

En este caso

$$h\nu = E_2 - E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} (2^2 - 1^2) = \frac{3h^2}{8ma^2}$$

luego

$$a = \sqrt{\frac{3h}{8m\nu}} = \sqrt{\frac{3 \times 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}}{8 \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 2.0 \times 10^{14} \text{ Hz}}} = 1.168 \times 10^{-9} \text{ m} = 1.168 \text{ nm}$$

27. Teniendo en cuenta las condiciones de continuidad que la función de onda debe satisfacer, que pasaría a los niveles de energía de una partícula en una caja monodimensional si la longitud de la caja cambia de a a a/j ($j = 2, 3, \dots$).

Solución:

La energía para una caja monodimensional de longitud a/j es

$$E_n = \frac{h^2}{8m(a/j)^2} n^2 = \frac{h^2}{8ma^2} n^2 j^2$$

luego al dividir la longitud de la caja j veces, aumenta la energía de los niveles j^2 veces.



28. Encontrar las funciones de onda y las correspondientes energías para los estados estacionarios de una partícula en una caja de potencial tridimensional de lados a , b y c .

Solución: Para una partícula en una caja tridimensional de lados a , b y c , la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

Aplicando el método de separación de variables, buscaremos soluciones de la forma

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z).$$

Sustituyendo en la ecuación y dividiendo por $X(x)Y(y)Z(z)$ obtenemos

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right] = E$$

De donde se deduce que cada uno de los términos del primer miembro tienen que ser constantes. Denominándolas E_x , E_y y E_z , reducimos el problema a tres problemas monodimensionales, cuyas soluciones ya conocemos. Por tanto, la solución general es

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}$$

con $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$, y

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

29. Para una partícula en una caja cúbica de lado a : (a) ¿Cuántos estados tienen energías en el rango de 0 a $16\hbar^2/8ma^2$? (b) ¿Cuántos niveles de energía caen en ese rango?.

Solución: En este caso los niveles de energía son

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

de donde se deduce (a) que el número de estados con energías en el rango de 0 a $16\hbar^2/8ma^2$ es 17, y (b) que corresponden a 6 niveles de energía.

n_x, n_y, n_z	$E_{n_x, n_y, n_z}/(\hbar^2/8ma^2)$	degeneración
1 1 1	3	1
1 1 2	6	3
1 2 1	6	
2 1 1	6	
1 2 2	9	3
2 1 2	9	
2 2 1	9	
1 1 3	11	3
1 3 1	11	
3 1 1	11	
2 2 2	12	1
1 2 3	14	6
1 3 2	14	
2 1 3	14	
2 3 1	14	
3 1 2	14	
3 2 1	14	



30. Para una partícula en una caja tridimensional de lados a, b y c con $a \neq b = c$, hacer una tabla de n_x, n_y, n_z , las energías y las degeneraciones de los niveles con números cuánticos en el rango de 1 a 5 (Tomar $a^2/b^2 = 2$).

Solución:

$$\text{En este caso los niveles de energía son } E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} [n_x^2 + 2(n_y^2 + n_z^2)]$$

En el rango de números cuánticos de 1 a 5 existen 125 estados, pondremos aquí solamente los 25 primeros

n_x, n_y, n_z	$E_{n_x, n_y, n_z}/(\hbar^2/8ma^2)$	degeneración
1 1 1	5	1
2 1 1	8	1
1 1 2	11	2
1 2 1	11	2
3 1 1	13	1
2 1 2	14	2
2 2 1	14	2
1 2 2	17	1
3 1 2	19	2
3 2 1	19	2
2 2 2	20	2
4 1 1	20	1
1 1 3	21	2
1 3 1	21	2
2 1 3	24	2
2 3 1	24	2
3 2 2	25	1
4 1 2	26	2
4 2 1	26	2
1 2 3	27	2
1 3 2	27	2
3 1 3	29	3
3 3 1	29	3
5 1 1	29	1
2 2 3	30	2
2 3 2	30	2

Nótese que en este caso además de degeneración debida a la simetría se producen casos de degeneración accidental (Véase cuando la energía vale $E_{n_x, n_y, n_z} = 29\hbar^2/8ma^2$).

31. Comprobar que la función $\phi = N \exp(-\alpha x^2/2)$ es solución de la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico. Relacionar α con la constante de fuerza del oscilador y la masa de la partícula, y calcular la energía correspondiente a esa solución.

Solución:

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el oscilador armónico monodimensional es

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right) \phi(x) = E\phi(x)$$

Para comprobar que es solución tenemos que sustituir $\phi = N \exp(-\alpha x^2/2)$, para lo que necesitamos la segunda derivada

$$\frac{d\phi}{dx} = N(-\alpha x) \exp(-\alpha x^2/2)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -N\alpha(1 - \alpha x^2) \exp(-\alpha x^2/2) = -\alpha(1 - \alpha x^2)\phi(x)$$



que será solución si

$$\frac{\hbar^2}{2m}\alpha(1 - \alpha x^2)\phi(x) + \frac{1}{2}kx^2\phi(x) = E\phi(x)$$

o lo que es lo mismo, si reordenamos

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\alpha - E\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{1}{2}k\right)x^2 = 0$$

que será nulo para todo valor de x si

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m}\alpha - E &= 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{1}{2}k &= 0\end{aligned}$$

De la segunda ecuación obtenemos el valor de α

$$\alpha = \sqrt{\frac{km}{\hbar^2}}$$

y de la primera el valor de la energía correspondiente a dicho estado

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{km}{\hbar^2}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}h\nu_e$$

donde ν_e es la frecuencia fundamental de vibración, definida por $\nu_e = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$.

32. La molécula HI tiene una constante de fuerza de enlace de 314 Nm^{-1} . Calcular para $^1H^{127}I$ y $^2D^{127}I$: (a) La frecuencia vibracional clásica en s^{-1} , (b) el número de onda correspondiente a la transición de $n = 0$ a $n = 1$ en el espectro vibracional.

Solución:

En este caso $\nu_e = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$, donde μ es la masa reducida definida por $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

$$\begin{aligned}\text{(a) Para el } ^1H^{127}I \mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{1.007825 \times 126.904473}{1.007825 + 126.904473} \text{ uma} = 0.999884 \text{ uma} \\ &= 0.999884 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \times \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} \times \frac{1}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 1.66039 \times 10^{-27} \text{ kg}\end{aligned}$$

de donde se deduce que

$$\nu_e = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{314 \text{ N m}^{-1}}{1.66039 \times 10^{-27} \text{ kg}}} = 6.92118 \times 10^{13} \text{ Hz}$$

$$h\nu = hc\tilde{\nu} = E_1 - E_0 = h\nu_e\left(1 + \frac{1}{2}\right) - h\nu_e\left(0 + \frac{1}{2}\right) = h\nu_e \rightarrow \nu = \nu_e$$

y (b)

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu_e}{c} = \frac{6.92118 \times 10^{13} \text{ Hz}}{2.998 \times 10^8 \text{ m/s}} \times \frac{1 \text{ m}}{100 \text{ cm}} = 2308.6 \text{ cm}^{-1}$$

Análogamente para el $^2D^{127}I$: $\mu = \frac{2.014102 \times 126.904473}{2.014102 + 126.904473} \text{ uma} = 1.982636 \text{ uma} = 3.29232 \times 10^{-27} \text{ kg}$, y (a) $\nu_e = 4.91512 \times 10^{13} \text{ Hz}$ y (b) $\tilde{\nu} = 1639.5 \text{ cm}^{-1}$.

33. Calcular la frecuencia de la radiación emitida cuando un oscilador armónico de frecuencia $6.0 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ salta del nivel $v = 8$ al $v = 7$.

Solución:

Como $E_v = h\nu_e(v + 1/2)$, la frecuencia de la transición es $h\nu = E_8 - E_7 = h\nu_e \rightarrow \nu = \nu_e = 6.0 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$.



34. Dada la función de onda normalizada para una partícula que se mueve en una dimensión

$$\phi(x) = (4\alpha^3/\pi)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2}$$

- Comprobar si existe algún valor de α para el cual esta función es solución de la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico monodimensional de masa m y constante de fuerza k .
- Obtener la densidad de probabilidad en $x = 0$.
- Calcular las posiciones de los máximos de la densidad de probabilidad en función de α .

Solución: La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el oscilador armónico monodimensional es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right) \phi(x) = E\phi(x)$$

Para comprobar que es solución tenemos que sustituir ϕ , para lo que necesitamos la segunda derivada

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi} \right)^{1/4} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} (-3\alpha + \alpha^2 x^2) = \phi (-3\alpha + \alpha^2 x^2)$$

que será solución si:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \alpha (-3 + \alpha x^2) \phi(x) + \frac{1}{2} kx^2 \phi(x) - E\phi(x) = 0$$

O lo que es lo mismo:

$$\left(\frac{3\hbar^2\alpha}{2m} - E \right) + \left(\frac{1}{2} kx^2 - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \right) \phi(x) = 0$$

que será nulo para todo valor de x si:

$$\frac{3\hbar^2\alpha}{2m} - E = 0$$

$$\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2}k = 0$$

De la segunda ecuación obtenemos el valor de $\alpha = \sqrt{\frac{km}{\hbar^2}}$

De la primera obtenemos el valor de la energía,

$$E = \frac{3\hbar^2\alpha}{2m} = \frac{3\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{km}{\hbar^2}} = \frac{3\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{3}{2} h\nu_e$$

La densidad de probabilidad para $x = 0$ es:

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

Para $x = 0$, $|\Psi|^2 = 0$.

Para calcular los máximos de la densidad, derivamos e igualamos a cero :

$$\left(\frac{4\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2} (2x e^{-\alpha x^2} - \alpha x^2 e^{-\alpha x^2}) = 0 \Rightarrow x(2e^{-\alpha x^2} - \alpha x e^{\alpha x^2}) = 0$$

Los puntos críticos son:

$x = 0$ (mínimo).

$x = \frac{2}{\alpha}$ (máximo).



35. Un oscilador armónico tridimensional tiene un potencial $V = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2 + \frac{1}{2}k_z z^2$, donde las tres constantes de fuerza no son necesariamente iguales. Escribir una expresión para los niveles de energía de este sistema ¿Cuál es el punto cero de energía?

Solución:

Aplicando el método de separación de variables, obtenemos que los niveles de energía se pueden expresar como

$$E_{v_x, v_y, v_z} = h\nu_x(v_x + \frac{1}{2}) + h\nu_y(v_y + \frac{1}{2}) + h\nu_z(v_z + \frac{1}{2})$$

donde $\nu_x = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_x}{\mu}}$, ..., y $v_x, v_y, v_z = 0, 1, 2, \dots$. La energía del punto cero es ($v_x, v_y, v_z = 0$)

$$E_{0,0,0} = h\nu_x \frac{1}{2} + h\nu_y \frac{1}{2} + h\nu_z \frac{1}{2}.$$

36. Expresar $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ en coordenadas polares.

Solución:

La relación entre las coordenadas cartesianas y las polares es:

$$\begin{cases} x = r \cos \phi \\ y = r \sin \phi \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x^2 + y^2 = r^2 \\ \frac{y}{x} = \tan \phi \end{cases}$$

por lo que las derivadas se pueden calcular aplicando la regla de la cadena

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}$$

donde

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial \sqrt{x^2 + y^2}}{\partial x} = \frac{1}{2} (x^2 + y^2)^{-1/2} 2x = \frac{x}{r} = \cos \phi$$

análogamente $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ se puede obtener derivando en la segunda ecuación

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{y}{x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \tan \phi \rightarrow -\frac{y}{x^2} = \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

de donde se obtiene

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2} \cos^2 \phi = -\frac{\sin \phi}{r}$$

que permite calcular

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \cos \phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} &= \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(\cos \phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) \\ &= \cos^2 \phi \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} - \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\Phi}{r} \right) - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\cos \phi \Phi) + \frac{\sin \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sin \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

Análogamente

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \phi$$

y

$$\frac{1}{x} = \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{x} \cos^2 \phi = \frac{\cos \phi}{r}$$

de donde se obtiene

$$\frac{\partial \Phi}{\partial y} = \sin \phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}$$



y

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} &= \left(\operatorname{sen} \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(\operatorname{sen} \phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) \\ &= \operatorname{sen}^2 \phi \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \operatorname{sen} \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\Phi}{r} \right) + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\operatorname{sen} \phi \Phi) + \frac{\cos \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\cos \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

de tal forma que

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Phi &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} - \frac{\operatorname{sen} \phi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\cos \phi \Phi) + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\operatorname{sen} \phi \Phi) \\ &\quad + \frac{\operatorname{sen} \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\operatorname{sen} \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) + \frac{\cos \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\cos \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) \\ &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} - \frac{\operatorname{sen} \phi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-\operatorname{sen} \phi \Phi + \cos \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\cos \phi \Phi + \operatorname{sen} \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right) \\ &\quad + \frac{\operatorname{sen} \phi}{r^2} \left(\cos \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} + \operatorname{sen} \phi \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\cos \phi}{r^2} \left(-\operatorname{sen} \phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} + \cos \phi \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \right) \\ &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

37. Mostrar que si $\Phi = N e^{im\phi}$ es una función definida entre 0 y 2π , la constante de normalización N vale $(2\pi)^{-1/2}$.

Solución:

La normalización se obtiene cuando

$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\phi)|^2 d\phi = 1 \rightarrow |N|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1 \rightarrow |N| = (2\pi)^{-1/2}.$$

38. Calcular la energía electrostática de dos electrones separados 3.0 \AA en el vacío. Expresar la respuesta en Julios, ergios y eV.

Solución:

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{(1.6022 \times 10^{-19} \text{ C})^2}{4\pi \times 8.8542 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1} \times 3.0 \text{ \AA}} \frac{1 \text{ F}}{\text{C/V}} \frac{1 \text{ \AA}}{10^{-10} \text{ m}} = 7.69 \times 10^{-19} \text{ J}$$

o en ergios

$$V = 7.69 \times 10^{-19} \text{ J} \times \frac{10^7 \text{ erg}}{1 \text{ J}} = 7.69 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

y en eV

$$V = V = 7.69 \times 10^{-19} \text{ J} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}} = 4.80 \text{ eV}$$

39. ¿Existe una atracción gravitatoria entre el electrón y el protón en el átomo de hidrógeno? Si existe ¿por qué no se tiene en cuenta en el Hamiltoniano? Hacer un cálculo para justificar la respuesta.

Solución:

La atracción gravitatoria es

$$V = -G \frac{m_e m_p}{r} = -6.673 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{s}^2 \text{ kg}} \frac{9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}}{r} = -\frac{1.017 \times 10^{-67}}{r} \text{ J m}$$

y la electrostática

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{(1.6022 \times 10^{-19} \text{ C})^2}{4\pi \times 8.8542 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1} r} \times \frac{1 \text{ F}}{\text{C/V}} = -\frac{2.31 \times 10^{-28}}{r} \text{ J m}$$



40. a) Supongamos $z_1 = a_1 + ib_1$ y $z_2 = a_2 + ib_2$, donde $i = \sqrt{-1}$ y los coeficientes a y b son reales. Si $z_1 = z_2$, indicar que condiciones tienen que cumplir los coeficientes a y b .

b) Verifique que para la función $\Phi(\phi) = N e^{im\phi}$ el requisito $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ conduce a la condición de que m sea un número entero.

Solución:

a) $z_1 = z_2 \rightarrow a_1 = a_2$ y $b_1 = b_2$

b) $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) \rightarrow e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} \rightarrow e^{im2\pi} = 1$

$\rightarrow \cos 2m\pi + i \sin 2m\pi = 1 \rightarrow \cos 2m\pi = 1$ y $\sin 2m\pi = 0 \rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

41. Usar la energía de ionización del H para predecir la de los iones He^+ , Li^{2+} y U^{91+} .

Solución:

Como $E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} E_h \rightarrow PI = E_\infty - E_1 = \frac{Z^2}{2} E_h$, tenemos que

$PI(H) = E_h/2 = 13.6 \text{ eV}$. $PI(\text{He}^+) = 2E_h = 4PI(H)$, $PI(\text{Li}^{2+}) = \frac{9}{2} E_h = 9PI(H)$, $PI(\text{U}^{91+}) = \frac{92^2}{2} E_h = 92^2 PI(H)$.

42. Calcular la longitud de onda del fotón emitido cuando un electrón salta del nivel $n = 3$ al $n = 2$ de un átomo hidrogenoide. Indicar para que estados es posible este salto.

Solución:

$\Delta E = E_3 - E_2 = \frac{Z^2}{2} E_h \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) = \frac{5}{72} Z^2 E_h$

luego $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{72}{5} \frac{hc}{Z^2 E_h} = \frac{0.65611 \times 10^{-6}}{Z^2} \text{ m}$

Z	$\lambda/\text{\AA}$
$Z = 1$	6561
$Z = 2$	1640
$Z = 3$	729
$Z = 4$	410

La transición es posible para los estados que cumplen $\Delta \ell = \pm 1$, luego son $2s \rightarrow 3p$, $2p \rightarrow 3s$ y $2p \rightarrow 3d$.

43. Ya que los átomos de H y D poseen distinta masa reducida, existirán pequeñas diferencias de energías entre sus niveles. Calcular los potenciales de ionización y la longitud de onda de la primera línea de la serie de Balmer para los dos isótopos.

Solución:

$H : m_p = 1.6726231 \times 10^{-27} \text{ kg}$ y $m_e = 9.1093897 \times 10^{-31} \text{ kg}$, luego $\mu_H = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} = 9.10443 \times 10^{-31} \text{ kg}$

$D : m_n = 1.6749286 \times 10^{-27} \text{ kg}$, luego $M_D = m_n + m_p$, y $\mu_D = \frac{M_D m_e}{M_D + m_e} = 9.10691 \times 10^{-31} \text{ kg}$

y las energías de los niveles son (ya que $PI = -E_1$)

$$PI(H) = \frac{\mu_H e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{9.10443 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.6022 \times 10^{-19} \text{ C})^4}{2(4\pi \times 8.8542 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1})^2 (1.055 \times 10^{-34} \text{ J s})^2} = 2.1792 \times 10^{-18} \text{ J} = 13.6024 \text{ eV}$$

y

$$PI(D) = \frac{\mu_D e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{9.10691 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.6022 \times 10^{-19} \text{ C})^4}{2(4\pi \times 8.8542 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1})^2 (1.055 \times 10^{-34} \text{ J s})^2} = 2.1798 \times 10^{-18} \text{ J} = 13.6061 \text{ eV}$$

Las líneas de la serie de Balmer corresponden a la transición $n = 2 \rightarrow n = 3$. La primera línea está a:

$$\Delta E(H) = E_3 - E_2 = 2.1792 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 3.0267 \times 10^{-19} \text{ J} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 6563 \text{\AA}$$



y

$$\Delta E(D) = E_3 - E_2 = 2.1798 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 3.0275 \times 10^{-19} \text{ J} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 6561 \text{ \AA}$$

44. Un átomo hidrogenoide tiene una serie de líneas espectrales a 26.2445, 19.4404, 17.3578 y 16.4028 nm. Calcular la carga nuclear del átomo y describir a qué transiciones corresponden cada una de las líneas espectrales.

Solución:

Los números de onda de las transiciones son

$$\Delta E = h\nu = hc\tilde{\nu} = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{Z^2}{2} E_h \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

De la longitud de onda de las dos primeras líneas de la serie podemos obtener el valor de n_1 y n_2 , ya que para la primera línea $n_2 = n_1 + 1$ y para la segunda $n_2 = n_1 + 2$

$$hc\tilde{\nu}_1 = \frac{Z^2}{2} E_h \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_1 + 1)^2} \right]$$

y

$$hc\tilde{\nu}_2 = \frac{Z^2}{2} E_h \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_1 + 2)^2} \right]$$

y su cociente vale

$$\frac{\tilde{\nu}_2}{\tilde{\nu}_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_1+2)^2}}{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_1+1)^2}} = \frac{(n_1 + 2)^2 - n_1^2}{(n_1 + 1)^2 - n_1^2} \times \frac{n_1^2(n_1 + 1)^2}{n_1^2(n_1 + 2)^2} = \frac{4n_1 + 4}{2n_1 + 1} \times \frac{(n_1 + 1)^2}{(n_1 + 2)^2}$$

luego

$$\frac{4n_1 + 4}{2n_1 + 1} \times \frac{(n_1 + 1)^2}{(n_1 + 2)^2} = \frac{26.2445}{19.4404} = 1.35 = \frac{27}{20} \rightarrow \frac{(n_1 + 1)^3}{(2n_1 + 1)(n_1 + 2)^2} = \frac{27}{80}$$

y como los dos miembros son números fraccionarios, los numeradores y denominadores son múltiplos entre sí. En este caso (k entero)

$$(n_1 + 1)^3 = 27k \rightarrow n_1 = 3k^{1/3} - 1$$

La primera posibilidad es $k = 1$, con lo que $n_1 = 2$. Si comprobamos este valor para el resto de los casos obtenemos que es el correcto. ($\lambda_1/\lambda_3 = 1.51$ y $\lambda_1/\lambda_4 = 1.60$).

El valor de Z se obtiene de una de las líneas:

$$hc\tilde{\nu}_1 = \frac{Z^2}{2} E_h \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = \frac{5}{36} \frac{Z^2}{2} E_h \rightarrow Z^2 = \frac{72hc}{5E_h\lambda_1} = 25.0$$

luego $Z = 5$.

45. ¿Cuáles de las siguientes transiciones están permitidas en el espectro electrónico de un átomo hidrogenoide?
(a) $2s \rightarrow 1s$ (b) $2p \rightarrow 1s$ (c) $3d \rightarrow 1s$ (d) $3d \rightarrow 3p$

Solución:

Estarán permitidas aquellas en las que $\Delta\ell = \pm 1$, es decir, (b) y (d). Nótese sin embargo que la última transición no da lugar a emisión o absorción de un fotón.

46. Demostrar que el máximo de la función de distribución radial para el estado fundamental de un átomo hidrogenoide está en $r = a_0/Z$. Encontrar los valores numéricos para C^{5+} y B^{3+} .

Solución:

La densidad de probabilidad radial se define como $P(r) = r^2|R(r)|^2$, donde $R(r)$ es la parte radial de la función de onda del estado fundamental. El máximo de la función de distribución radial se obtiene igualando a cero la primera derivada

$$\left. \frac{dP(r)}{dr} \right|_{r_m} = 0 \rightarrow \left. \frac{d}{dr} r^2 \exp[-2Zr/a_0] \right|_{r_m} = (2r - 2Zr^2/a_0) \exp[-2Zr/a_0] \Big|_{r_m} = 0 \rightarrow r_m = a_0/Z$$

Luego para el C^{5+} , $r_m = a_0/6$, y para el B^{3+} , $r_m = a_0/4$.



47. Calcular la probabilidad de que el electrón en el estado 1s del átomo de hidrógeno esté a una distancia del núcleo entre 0 y 2.0 Å

Solución:

La función de onda del estado fundamental para un átomo hidrogenoide es $\phi_{1s} = \left[\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right]^{1/2} \exp[-Zr/a_0]$, por lo que la probabilidad de encontrar el electrón en una esfera de radio R es

$$P(r < R) = \int_0^R dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^2 \sin \theta |\phi_{1s}|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \int_0^R dr r^2 \exp[-2Zr/a_0] \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi =$$

$$\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \int_0^R dr r^2 \exp[-2Zr/a_0] [-\cos \theta]_0^\pi 2\pi = \frac{4Z^3}{a_0^3} \int_0^R dr r^2 \exp[-2Zr/a_0]$$

que requiere del cálculo, por partes, de la siguiente integral

$$I(R) = \int_0^R dr r^2 \exp[-\alpha r]$$

con $\alpha = 2Z/a_0$. El resultado es

$$I(R) = \frac{2}{\alpha^3} \left[1 - \left(\frac{\alpha^2 R^2}{2} + \alpha R + 1 \right) \exp[-\alpha R] \right]$$

y

$$P(r < R) = \frac{4Z^3}{a_0^3} \frac{2a_0^3}{8Z^3} \left[1 - \left(\frac{2Z^2 R^2}{a_0^2} + \frac{2ZR}{a_0} + 1 \right) \exp[-2ZR/a_0] \right] =$$

$$1 - \left(\frac{2Z^2 R^2}{a_0^2} + \frac{2ZR}{a_0} + 1 \right) \exp[-2ZR/a_0]$$

$R/\text{Å}$	$P(R)$
1.	0.72777
1.5	0.92153
2.	0.98064
2.5	0.99566
3.	0.99909
3.5	0.99982
4.	0.99996
4.5	0.99999
∞	1.00000

48. Comprobar que la constante de normalización N del orbital 1s: $\phi_{1s} = N \exp[-Zr/a_0]$ es $N = \left[\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right]^{1/2}$

Solución:

La condición de normalización es

$$\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^2 \sin \theta |\phi_{1s}|^2 = 1$$

es decir, para el estado fundamental

$$|N|^2 \int_0^\infty dr r^2 \exp[-2Zr/a_0] \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi = |N|^2 \int_0^\infty dr r^2 \exp[-2Zr/a_0] [-\cos \theta]_0^\pi 2\pi = 1$$

$$|N|^2 \int_0^\infty dr r^2 \exp[-2Zr/a_0] 4\pi = 1$$



La integral en r la podemos obtener del problema anterior, y su resultado es

$$I(\infty) = \int_0^{\infty} dr r^2 \exp[-\alpha r] = \frac{2}{\alpha^3}$$

con $\alpha = 2Z/a_0$. Luego

$$|N|^2 \frac{2a_0^3}{(2Z)^3} 4\pi = 1 \rightarrow |N| = \left[\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right]^{1/2}$$

49. La función de onda normalizada del orbital 1s de un átomo hidrogenoide es:

$$\phi_{1s} = (Z^3/\pi a_0^3)^{1/2} e^{-Zr/a_0}$$

- Determinar el valor medio de la distancia del núcleo al electrón para el orbital 1s del átomo de H y del ion He^+ .
- Comparar los resultados del apartado anterior con el valor del máximo de la función de distribución radial.
- Determinar el valor medio de la energía potencial en ambos sistemas.

Solución:

a)

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin\theta \sqrt{\frac{z^3}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{zr}{a_0}} r \sqrt{\frac{z^3}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{zr}{a_0}} = \frac{3a_0}{2z}$$

Para el hidrógeno, $Z = 1$, $\langle r \rangle = \frac{3}{2}a_0$, para el He^+ $Z = 2$, $\langle r \rangle = \frac{3}{4}a_0$

b) La función de distribución radial es proporcional a $r^2(R)^2 \sim \frac{z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2zr}{a_0}}$

Para calcular el máximo se deriva la función y se iguala a cero:

$$\frac{\partial}{\partial r} (r^2 e^{-\frac{2zr}{a_0}}) = 0$$

Se obtiene $r_m = \frac{a_0}{z}$. Para el hidrógeno ($Z = 1$), $r_m = a_0$. Para el He^+ , $Z = 2$, $r_m = \frac{a_0}{2}$

c)

$$\langle V \rangle = \left\langle -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\theta \sqrt{\frac{z^3}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{zr}{a_0}} r \sqrt{\frac{z^3}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{zr}{a_0}} = \frac{-z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$$

Para el hidrógeno $Z = 1$, y $V = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$. Para el He^+ , $Z = 2$, y $V = \frac{-4e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$

50. Dado el siguiente orbital del átomo de hidrógeno:

$$\psi = N r e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\theta$$

- Encontrar sus números cuánticos y decir de que orbital se trata.
- Usando los resultados del apartado anterior, decir cuánto vale el módulo del momento angular del electrón cuando está en este estado.
- Decir cuánto vale la proyección sobre el eje z del momento angular del electrón cuando está en este estado.
- Encontrar sus planos nodales.
- Comprobar que su constante de normalización vale $N = \left(\frac{1}{32\pi a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}}$
- Calcular el valor más probable de la distancia entre el electrón y el núcleo.
- Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $r = 0$ y $r = 4a_0$.
- Calcular el valor medio de r y de la energía potencial.
- Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $\theta = 0$ y $\theta = 10^\circ$.



- j) Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $\theta = 170^\circ$ y $\theta = 180^\circ$.
 k) Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $\theta = 80^\circ$ y $\theta = 100^\circ$.
 l) Evaluar la densidad de probabilidad en los puntos $(x = 0, y = 0, z = 2a_0)$ y $(x = a_0, y = a_0, z = 0)$.

Solución: Solución:

- a) Los números cuánticos son: $n=2, \ell=1, m_\ell=0$. El orbital es: $2p_z$.
 b) El módulo del momento angular es: $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} = \sqrt{2}\hbar$.
 c) La proyección del momento angular sobre el eje z es: $L_z = m_\ell\hbar = 0$.
 d) Los planos nodales son: $\cos\theta = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow z = 0$.
 e) $1 = N^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos^2\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = N^2 (4! a_0^5) \left(\frac{2}{3}\right) (2\pi) = N^2 8a_0^5 4\pi = 32\pi a_0^5 N^2 \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^5}}$.
 f) El valor de la distancia más probable es:

$$P(r) = r^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\Psi|^2 = \frac{r^2}{32\pi a_0^5} \frac{4\pi}{3} r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} = \frac{1}{24a_0^5} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} = c r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Derivamos la función P(r) para calcular los valores máximo y mínimo:

$$P'(r) = c [4r^3 e^{-\frac{r}{a_0}} - \frac{1}{a_0} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}] = 0.$$

Resolviendo esta ecuación obtenemos: $r_1 = 0, r_2 = 4a_0$. El mínimo es $r = 0$, y el valor más probable es $r_m = 4a_0$.

- g) La probabilidad es:

$$P(0 \leq r \leq 4a_0) = \int_0^{4a_0} dr P(r) = c \int_0^{4a_0} dr r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} = c a_0^5 \int_0^4 dx x^4 e^{-x}.$$

Resolviendo la integral por partes tomando $u=x^4$ y $v=e^{-x}$, el resultado es $0.371 \equiv 37.1$

- h) El valor del radio medio es:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr r P(r) = c \int_0^\infty dr r^5 e^{-\frac{r}{a_0}} = 5! a_0^6 / 24 a_0^5 = 5a_0.$$

La energía potencial es:

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle 1/r \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty dr dr \frac{1}{r} P(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} c \int_0^\infty dr r^3 e^{-r/a_0} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3! a_0^4}{24 a_0^5} = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = -\frac{1}{4} E_h. \end{aligned}$$

- i) La probabilidad entre $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 10^\circ$ es:

$$\begin{aligned} P &= \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{\theta_0} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Psi^2 = \frac{1}{32\pi a_0^5} \int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} \int_0^{\theta_0} d\theta \sin\theta \cos^2\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\ &= \frac{1}{32\pi a_0^5} (4! a_0^5) (2\pi) \left(-\frac{\cos^3\theta}{3}\right) \Big|_0^{\theta_0} = \frac{1}{2} (1 - \cos^3\theta_0) = 0.022 \equiv 2.2\%. \end{aligned}$$

- j) La probabilidad entre $\theta = 170^\circ$ y $\theta = 180^\circ$ es:

$$P = \frac{1}{2} [\cos^3(170^\circ) - \cos^3(180^\circ)] = \frac{1}{2} [1 + \cos^3(170^\circ)] = 0.022.$$



k) La probabilidad entre $\theta = 80^\circ$ y $\theta = 100^\circ$ es:

$$P = \frac{1}{2}[\cos^3(80^\circ) - \cos^3(100^\circ)] = 0.005 \equiv 0.5\%$$

l) Para $x = 0, y = 0, z = 2a_0, r = 2a_0$, la densidad de probabilidad es:

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{32\pi a_0^5} e^{-\frac{r z^2}{a_0}} = \frac{1}{32\pi a_0^5} e^{-2 \cdot 4a_0^2} = \frac{e^{-2}}{8\pi a_0^3} = \frac{1}{8\pi e^2 a_0^3}$$

Para $x = a_0, y = a_0, z = 0 \Rightarrow \Psi = 0, |\Psi|^2 = 0$.

51. Comprobar que la función $f(r, \theta) = Nr \exp[-Zr/2a_0] \cos \theta$ es solución de la ecuación de Schrödinger para un átomo hidrogenoide y obtener la energía de esta función.

Solución:

La función $f(r, \theta)$ será solución de la ecuación de Schrödinger si cumple $\hat{H}f = Ef$, donde el Hamiltoniano viene dado, en coordenadas esféricas, por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Veamos la aplicación de cada uno de los términos a la función $f(r, \theta)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} f(r, \theta) &= \frac{\partial}{\partial r} r^2 N \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) \exp[-Zr/2a_0] \cos \theta = N \left(2 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2 r^2}{4a_0^2} \right) r \exp[-Zr/2a_0] \cos \theta = \\ &= \left(2 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2 r^2}{4a_0^2} \right) f(r, \theta) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} f(r, \theta) &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Nr \exp[-Zr/2a_0] \cos \theta = Nr \exp[-Zr/2a_0] \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (-\sin^2 \theta) = \\ &= Nr \exp[-Zr/2a_0] \frac{1}{\sin \theta} (-2 \sin \theta \cos \theta) = -2Nr \exp[-Zr/2a_0] \cos \theta = -2f(r, \theta) \end{aligned}$$

y

$$\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} f(r, \theta) = 0$$

Así, obtenemos que

$$\begin{aligned} \hat{H}f(r, \theta) &= \hat{H} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} f(r, \theta) = \\ &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \left(2 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2 r^2}{4a_0^2} - 2 \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} f(r, \theta) = \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{2Z}{a_0} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{r} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{Z^2}{4a_0^2} \right\} f(r, \theta) \end{aligned}$$

y como $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$ los dos primeros términos se anulan, quedando

$$\hat{H}f(r, \theta) = -\frac{Z^2 \hbar^2}{8m_e a_0^2} f(r, \theta)$$

de donde se deduce que el valor de la energía es $E = -\frac{Z^2 \hbar^2}{8m_e a_0^2}$



52. Establecer si cada una de estas funciones es simétrica, antisimétrica o ni una cosa ni la otra

(a) $f(1)g(2)$ (b) $g(1)g(2)$ (c) $f(1)g(2) - g(1)f(2)$ (d) $r_1^2 - 2r_1r_2 + r_2^2$ (e) $(r_1 - r_2)e^{-br_{12}}$

donde f y g son funciones arbitrarias de las coordenadas de las partículas idénticas 1 y 2, r_1 , r_2 son las distancias de las partículas al núcleo y r_{12} la distancia entre las dos.

Solución:

Para saber si son o no antisimétricas con respecto al intercambio de las dos partículas idénticas, tenemos que intercambiarlas

(a) $f(1)g(2) \rightarrow f(2)g(1)$, luego ni es simétrica ni antisimétrica (si f y g son distintas).

(b) $g(1)g(2) \rightarrow g(2)g(1) = g(1)g(2)$, luego es simétrica.

(c) $f(1)g(2) - g(1)f(2) \rightarrow f(2)g(1) - g(2)f(1) = -[f(1)g(2) - g(1)f(2)]$, luego es antisimétrica.

(d) $r_1^2 - 2r_1r_2 + r_2^2 \rightarrow r_2^2 - 2r_2r_1 + r_1^2 = r_1^2 - 2r_1r_2 + r_2^2$, luego es simétrica.

(e) $(r_1 - r_2)e^{-br_{12}} \rightarrow (r_2 - r_1)e^{-br_{21}} = -(r_1 - r_2)e^{-br_{12}}$, luego es antisimétrica.

53. Tomando

$$\Psi(1, 2) = \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_B(1) \\ \psi_A(2) & \psi_B(2) \end{vmatrix}$$

demostrar que

(a) el intercambio de 2 columnas cambia el signo de Ψ ,

(b) el intercambio de 2 filas cambia el signo de Ψ ,

(c) los dos electrones no pueden estar en el mismo espín-orbital.

Solución:

De la definición de determinante tenemos que

$$\Psi(1, 2) = \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_B(1) \\ \psi_A(2) & \psi_B(2) \end{vmatrix} = \psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_B(1)\psi_A(2)$$

(a) Si intercambiamos 2 columnas, el determinante que queda es

$$\begin{vmatrix} \psi_B(1) & \psi_A(1) \\ \psi_B(2) & \psi_A(2) \end{vmatrix} = \psi_B(1)\psi_A(2) - \psi_A(1)\psi_B(2) = -[\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_B(1)\psi_A(2)] = - \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_B(1) \\ \psi_A(2) & \psi_B(2) \end{vmatrix}$$

(b) si lo que intercambiamos son las 2 filas

$$\begin{vmatrix} \psi_A(2) & \psi_B(2) \\ \psi_A(1) & \psi_B(1) \end{vmatrix} = \psi_A(2)\psi_B(1) - \psi_B(2)\psi_A(1) = -[\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_B(1)\psi_A(2)] = - \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_B(1) \\ \psi_A(2) & \psi_B(2) \end{vmatrix}$$

(c) Si dos electrones ocupan el mismo espín-orbital, entonces $\psi_A = \psi_B$, y el determinante vale

$$\Psi(1, 2) = \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_A(1) \\ \psi_A(2) & \psi_A(2) \end{vmatrix} = \psi_A(1)\psi_A(2) - \psi_A(1)\psi_A(2) = 0$$

54. Mostrar que la siguiente función de onda para el átomo de helio es antisimétrica con respecto al intercambio de los dos electrones

$$\Psi(1, 2) = \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) \end{vmatrix}$$

Solución:

De la definición de determinante tenemos que

$$\Psi(1, 2) = \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) \end{vmatrix} = 1s\alpha(1)1s\beta(2) - 1s\beta(1)1s\alpha(2)$$



Si intercambiamos los dos electrones, el determinante queda

$$\Psi(2, 1) = \begin{vmatrix} 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) \\ 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) \end{vmatrix} = 1s\alpha(2)1s\beta(1) - 1s\beta(2)1s\alpha(1) =$$

$$- [1s\alpha(1)1s\beta(2) - 1s\beta(1)1s\alpha(2)] = - \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) \end{vmatrix} = -\Psi(1, 2)$$

55. Los primeros potenciales de ionización del Na, K y Rb son 5.138, 4.341 y 4.166 eV, respectivamente. Suponiendo que el nivel de energía del electrón mas externo puede representarse por la energía de los orbitales hidrogenoides con una carga nuclear efectiva Z_{ef} , y que los orbitales importantes son los 3s, 4s y 5s, respectivamente, calcular Z_{ef} para estos átomos

Solución:

La energía de los orbitales hidrogenoides es

$$E = -\frac{Z^2}{2n^2}E_h = -13.605\frac{Z^2}{n^2} \text{ eV.}$$

Suponiendo valida una ecuación de este tipo (donde Z se sustituye por Z_{ef} , tenemos que para el Na

$$Z_{ef}^2 = \frac{5.138}{13.605}3^2 = 3.40 \rightarrow Z_{ef} = 1.84$$

para el K

$$Z_{ef}^2 = \frac{4.341}{13.605}4^2 = 5.105 \rightarrow Z_{ef} = 2.26$$

y para el Rb

$$Z_{ef}^2 = \frac{4.166}{13.605}5^2 = 7.655 \rightarrow Z_{ef} = 2.77$$

lo que indica que al bajar en un grupo la carga nuclear efectiva que siente el electrón de valencia es prácticamente constante (nótese que las cargas nucleares aumentan mucho: $Z_{\text{Na}} = 11$, $Z_{\text{K}} = 19$ y $Z_{\text{Rb}} = 37$).

56. Escriba el hamiltoniano para el movimiento interno del átomo de Li.

Solución:

El Hamiltoniano para el átomo de Li es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_3^2 - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{13}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{23}}$$

57. Dados los orbitales atómicos 1s y 2s del átomo de Be, construir el determinante de Slater para el estado fundamental.

Solución:

$$\Psi(1, 2, 3, 4) = \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 2s\alpha(1) & 2s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 2s\alpha(2) & 2s\beta(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 2s\alpha(3) & 2s\beta(3) \\ 1s\alpha(4) & 1s\beta(4) & 2s\alpha(4) & 2s\beta(4) \end{vmatrix}$$

58. Deducir el término espectral para el estado fundamental correspondiente a las configuraciones $np^1 n'p^1$, $ns np^5$, $ns nd$, np^2 , np^3 , nd^2 , teniendo en cuenta las reglas de Hund.

Solución:

- $np^1 n'p^1$: En este caso $L = 2$, $S = 1$, es decir 3D
- $ns np^5$: Es análoga a $ns np$, luego es 3P
- $ns nd$: 3D



- np^2 : 3P
- np^3 : 5S
- nd^2 : 3F

59. Deducir el término espectral para el estado fundamental de los átomos de He, Li, Be, B, C, N, O y F.

Solución:

- He($1s^2$): 1S
- Li($1s^2 2s$): 2S
- Be($1s^2 2s^2$): 1S
- B($1s^2 2s^2 2p$): 2P
- C($1s^2 2s^2 2p^2$): 3P
- N($1s^2 2s^2 2p^3$): 4S
- O($1s^2 2s^2 2p^4$): 3P
- F($1s^2 2s^2 2p^5$): 2P

60. Deducir los términos espectrales posibles de las configuraciones:

- $1s2s$ del átomo de He
- $1s2p$ del átomo de He
- $1s^2 2p$ del átomo de Li
- $1s^2 2s 2p$ del átomo de Be

Solución:

- $1s2s$ del átomo de He: 3S y 1S
- $1s2p$ del átomo de He 3P y 1P
- $1s^2 2p$ del átomo de Li 2P
- $1s^2 2s 2p$ del átomo de Be 3P y 1P

61. Calcular la energía de repulsión nuclear para la molécula de H_2O dadas las siguientes coordenadas cartesianas nucleares

Átomo	x/a_0	y/a_0	z/a_0
O	0	0	0
H	-1.2	-1.	0
H	1.2	-1.	0

Solución:

$$V_{\text{repulsión}} = \frac{Z_H Z_O e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{H_A O}} + \frac{Z_H Z_O e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{H_B O}} + \frac{Z_H^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{H_A H_B}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{8}{R_{H_A O}} + \frac{8}{R_{H_B O}} + \frac{1}{R_{H_A H_B}} \right\}$$

Como las distancias internucleares son (en Bohr)

$$R_{H_A O}^2 = (x_{H_A} - x_O)^2 + (y_{H_A} - y_O)^2 + (z_{H_A} - z_O)^2 = (1.2)^2 + (-1.0)^2 + 0^2 = 2.44$$

$$R_{H_A O} = \sqrt{2.44} = 1.562a_0$$

Análogamente, tenemos $R_{H_B O} = 1.562a_0$ y $R_{H_A H_B} = 2.4a_0$, por lo que $V_{\text{repulsión}} = 10.660 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = 10.660 E_H$



$R(\widehat{OH})$	0.958 Å
\widehat{HOH}	104.5°

62. Calcular la energía de repulsión nuclear para la molécula de H_2O dadas las siguientes coordenadas internas nucleares

Solución:

Las distancias internucleares en este caso valen:

$$R_{OH_1} = R_{OH_2} = 0.958 \text{ \AA} = 1.810 a_0$$

Como $\vec{R}_{HH} + \vec{R}_{OH_2} = \vec{R}_{OH_1}$, tenemos que la otra distancia $H - H$ vale:

$$R_{H_1H_2}^2 = R_{OH_1}^2 + R_{OH_2}^2 - R_{OH_1} R_{OH_2} \cos \widehat{HOH}$$

es decir,

$$R_{H_1H_2}^2 = 2 \times (0.958 a_0)^2 - 2 \times (0.958 a_0)^2 \cos 104.5^\circ \rightarrow R_{H_1H_2} = 0.958 \sqrt{2(1 - \cos 104.5^\circ)} \text{ \AA} = 1.515 \text{ \AA} = 2.860 a_0$$

y

$$V_{\text{repulsión}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \left\{ 2 \times \frac{8}{1.810} + \frac{1}{2.860} \right\} = 9.186 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = 9.186 E_H$$

63. El primer estado excitado del He_2 se obtiene excitando un electrón del OM antienlazante $1\sigma_u$ al OM enlazante $2\sigma_g$. Escribe la configuración electrónica. ¿Cuales son las posibles funciones de onda incluyendo el espín? ¿Cual es el orden de enlace? Indicar si los estados electrónicos son g o u .

Solución:

La configuración electrónica del estado fundamental del He_2 es:

$$He_2 : (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 \rightarrow ^1 \Sigma_g \quad OE = 0$$

y la excitada

$$He_2 : (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^1 (2\sigma_g)^1 \rightarrow ^1 \Sigma_u, ^3 \Sigma_u, \quad OE = \frac{3-1}{2} = 1$$

y las funciones de onda son, para el estado fundamental

$$\Phi_{1\Sigma_g} = || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\alpha \ 1\sigma_u\beta ||$$

y para los excitados

$$\Phi_{1\Sigma_u} = || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\alpha \ 2\sigma_g\beta || - || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\beta \ 2\sigma_g\alpha ||$$

$$\Phi_{3\Sigma_u} = || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\alpha \ 2\sigma_g\alpha ||$$

$$\Phi_{3\Sigma_u} = || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\beta \ 2\sigma_g\beta ||$$

$$\Phi_{3\Sigma_u} = || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\alpha \ 2\sigma_g\beta || + || 1\sigma_g\alpha \ 1\sigma_g\beta \ 1\sigma_u\beta \ 2\sigma_g\alpha ||$$

64. Describir el estado electrónico fundamental y la multiplicidad, utilizando las configuraciones electrónicas, de las siguientes especies:

a) He_2^+ , b) Li_2 , c) Be_2 , d) C_2 , e) N_2 , f) F_2 .

Solución:



- He_2^+ : 3 electrones $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^1 \rightarrow^2 \Sigma_u^+$
- Li_2 : 6 electrones $[He_2](2\sigma_g)^2 \rightarrow^1 \Sigma_g^+$
- Be_2 : 8 electrones $[He_2](2\sigma_g)^2(2\sigma_u^*)^2 \rightarrow^1 \Sigma_g^+$
- C_2 : 12 electrones $[Be_2](1\pi_u)^4 \rightarrow^1 \Sigma_g^+$
- N_2 : 14 electrones $[Be_2](1\pi_u)^4(3\sigma_g)^2 \rightarrow^1 \Sigma_g^+$
- F_2 : 18 electrones $[N_2](1\pi_g^*)^4 \rightarrow^1 \Sigma_g^+$

65. Calcular la densidad de probabilidad electrónica en el punto medio de los hidrógenos en el H_2^+ para los estados descritos por

a) $\phi_+ = 0.56(1s_A + 1s_B)$, b) $\phi_- = 1.10(1s_A - 1s_B)$

para la distancia internuclear $R = 106$ pm.

Solución:

Para ello necesitamos la expresión del orbital atómico

$$1s = N \exp(-r/a_0) = \left[\frac{1}{\pi a_0^3} \right]^{1/2} \exp(-r/a_0)$$

a) En este caso

$$|\phi_+|^2 = 0.56^2(1s_A + 1s_B)^2 = 0.56^2(1s_A^2 + 1s_B^2 + 2 \times 1s_A \times 1s_B) = 0.56^2 N^2 [\exp(-2r_A/a_0) + \exp(-2r_B/a_0) + 2 \times \exp(-(r_A + r_B)/a_0)]$$

y como en el centro $r_A = r_B = R/2$,

$$|\phi_+|^2 = 4 \times 0.56^2 N^2 \exp(-R/a_0)$$

Como en el equilibrio $R = 106 \text{ pm} = 1.06 \text{ \AA} = 2.00 a_0$,

$$|\phi_+|^2 = 0.16976 N^2 = 0.16976 \frac{1}{\pi a_0^3}$$

que se puede comparar con el resultado de considerar los átomos por separado:

$$|\phi_{atom}|^2 = 0.56^2(1s_A^2 + 1s_B^2) = 2 \times 0.56^2 N^2 \exp(-R/a_0) = 0.08488 N^2 = 0.08488 \frac{1}{\pi a_0^3}$$

luego $\frac{|\phi_+|^2}{|\phi_{atom}|^2} = 2.0$ y la diferencia entre las densidades es $\Delta\rho = \rho_{mol} - \rho_{atom} = |\phi_+|^2 - |\phi_{atom}|^2 = 0.08488 N^2 = 0.08488 \frac{1}{\pi a_0^3}$

b) Análogamente

$$|\phi_-|^2 = 0.56^2(1s_A - 1s_B)^2 = 0.56^2(1s_A^2 + 1s_B^2 - 2 \times 1s_A \times 1s_B) = 0 \left[\frac{1}{\pi a_0^3} \right]$$

66. Aplicando la teoría de orbitales moleculares, indíquese cuál de las siguientes moléculas, F_2 , F_2^- y F_2^+ , tendrá mayor energía de disociación.

Solución:

Para saber cual de las moléculas tendría mayor energía de disociación necesitamos calcular el orden de enlace:

$$F_2^+ : (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u^*)^2 (3\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g^*)^3 \quad \text{O.E.} = \frac{3}{2}$$

$$F_2 : (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u^*)^2 (3\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g^*)^4 \quad \text{O.E.} = 1.$$

$$F_2^- : (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u^*)^2 (3\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g^*)^4 (3\sigma_u^*)^1 \quad \text{O.E.} = \frac{1}{2}$$

El orden de energía de disociación es: $D_e(F_2^+) > D_e(F_2) > D_e(F_2^-)$



67. Dibujar el diagrama de niveles de energía de la molécula de O_2^+ . Determinar su estructura electrónica y justificar que su estado fundamental es $^2\Pi_g$.

Solución:

La estructura electrónica del O_2^+ es:

$$(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u^*)^2 (3\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g^*)^1$$

Para esta configuración el estado fundamental corresponde a $^2\Pi_g$

68. Deducir el término espectral más estable correspondiente a cada una de las siguientes configuraciones electrónicas de moléculas diatómicas homonucleares: σ_u^2 , $\sigma_u\sigma'_u$, $\sigma_g\sigma_u$, $\sigma_g\pi_u$, $\pi_g\pi_u$, π_g^2 , π_u^3 .

Solución:

$$\sigma_u^2 \Rightarrow ^1\Sigma_g^+$$

$$\sigma_u\sigma'_u \Rightarrow ^1\Sigma_g^+, ^3\Sigma_g^+ \Rightarrow ^3\Sigma_g^+$$

$$\sigma_g\sigma_u \Rightarrow ^1\Sigma_u^+, ^3\Sigma_u^+ \Rightarrow ^3\Sigma_u^+$$

$$\sigma_g\pi_u \Rightarrow ^1\Pi_u, ^3\Pi_u \Rightarrow ^3\Pi_u$$

$$\pi_g\pi_u \Rightarrow ^1\Sigma_u^+, ^3\Sigma_u^+, ^1\Sigma_u^-, ^3\Sigma_u^-, ^1\Delta_u, ^3\Delta_u \Rightarrow ^3\Delta_u$$

$$\pi_g^2 \Rightarrow ^1\Delta_g, ^3\Sigma_g^-, ^1\Sigma_g^+ \Rightarrow ^3\Sigma_g^-$$

$$\pi_u^3 = \pi_u \Rightarrow ^2\Pi_u$$

69. Dadas las curvas de energía potencial para las moléculas diatómicas H_2^+ y H_2 , calcular la energía de disociación del H_2^+ ($D_0(H_2^+)$) sabiendo que la energía de disociación del H_2 es $D_0(H_2) = 4.478$ eV y que el potencial de ionización del H_2 es $PI(H_2) = 15.426$ eV.

Solución:

De la figura se deduce que:

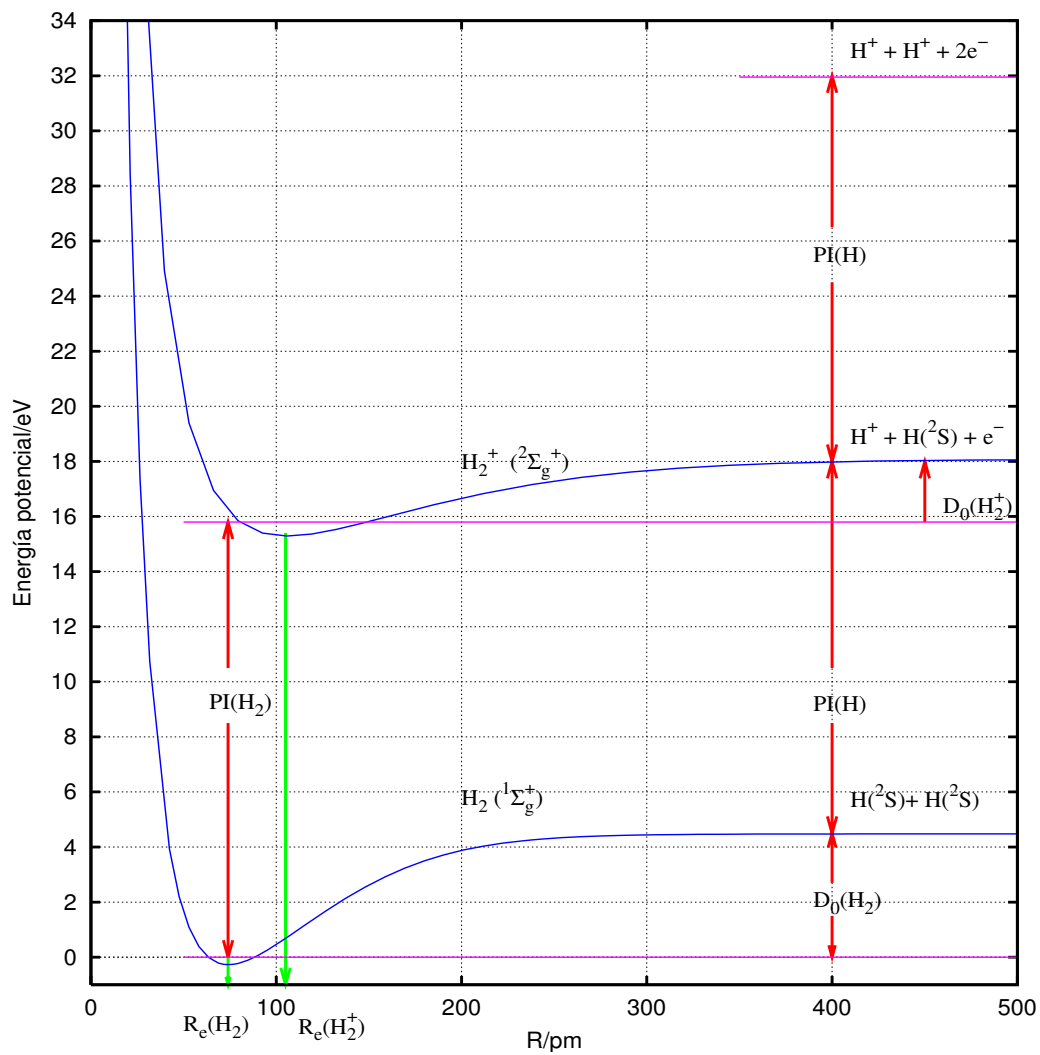
$$PI(H_2) + D_0(H_2^+) = D_0(H_2) + PI(H)$$

Como $PI(H) = 0.5E_h = 13.605$ eV, tenemos

$$D_0(H_2^+) = D_0(H_2) + PI(H) - PI(H_2) = 4.478\text{eV} + 13.605\text{eV} - 15.426\text{eV} = 2.657\text{eV}$$

70. Calcular R_e , D_0 , D_e para las moléculas diatómicas H_2 y H_2^+ de la gráfica anterior, así como el PI del H_2 .





71. En la siguiente figura se representa la superficie de energía potencial para la reacción colineal $HF + H \rightarrow F + H_2$. Indicar cuáles son los reactivos, productos, estado de transición y dibujar cualitativamente el camino de mínima energía.



