Fundamentos de Espectroscopia
Departamento de Física – FBCB Primer Parcial 3/10/13

Problema 1
Las funciones de onda que representan a una partícula libre moviéndose sin restricciones en el eje x son soluciones de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo $\mathscr{H}\varphi = E\varphi$. Este sistema posee solo energía ……………,por lo tanto el operador energía (hamiltoniano) que se plantea en este caso es $\mathscr{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$.
a) Verifique que las funciones $\varphi_1=Ae^{ikx}$ y $\varphi_2=Be^{-ikx}$ son autofunciones del $\mathscr{H}$ del sistema y calcule el autovalor de energía. ¿Está cuantizada? Justifique.
b) Verifique que las funciones propuesta son también autofunciones del operador cantidad de movimiento $p=(\hbar/i)d/dx$ y calcule el valor observable para cada caso.
c) Indique, de acuerdo al resultado obtenido en b), qué situación particular de la partícula libre se describe con cada una de estas funciones.
e) Calcule la densidad de probabilidad para $\varphi_2=Be^{-ikx}$ y explique por qué se verifica el principio de incertidumbre.

Problema 2
Una partícula de masa m confinada en una caja unidimensional de ancho L y paredes infinitas está representada por la función $\varphi_n = (2/L)^{1/2}\mathrm{sen}(n\pi/L)x$ y sus autovalores son $E_n=n^2h^2/8mL^2$
a) Indique qué valores puede tomar n. Describa brevemente de dónde surge esa restricción.
b) Encuentre la expresión de la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos e indique cómo varía con el aumento de L. Explique cómo puedo determinar a partir de esta expresión si los niveles de energía permitidos están equiespaciados.
c) Realice un gráfico en el que represente los 3 primeros niveles de energía y verifique que la diferencia de energía entre los niveles 2 y 3 está de acuerdo con la obtenida a partir de la expresión calculada en b)
d) Grafique las 3 primeras funciones de onda y las densidades de probabilidad correspondientes.

Si se considera ahora la partícula confinada en una caja rectangular de lados L_1 y L_2
d) Exprese el autovalor de energía y la expresión de la autofunción para $n_x=1$ y $n_y=2$. Verifique que el estado $n_x=2$ y $n_y=1$ es un estado degenerado con respecto al anterior.

Problema 3
Los niveles de energía permitidos para una partícula de masa m con un movimiento armónico de constante k son $E_v = (v+1/2)\hbar\omega$ donde v = 0,1,2….. y $\omega = (k/m)^{1/2}$
a) Grafique los 3 primeros niveles de energía. Calcule la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos y verifique que están equiespaciados?
b) Analice cómo cambia la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos con el aumento de la fuerza elástica y con el aumento de la masa de la partícula.

Problema 4
Una partícula de masa m moviéndose sobre una *circunferencia* de radio r en el plano xy (rotor rígido en un plano) está representada por la función $\varphi = (1/2)^{1/2}e^{i\, ml\, \phi}$ y sus autovalores de energía son $E= \hbar^2 m_l^2/2I$ donde $I = mr^2$
a) Verifique que la función propuesta es también autofunción de la componente z del operador cantidad de movimiento angular $l_z=(\hbar/i)d/d\phi$ y calcule el autovalor (observable). Explique cómo se interpreta el doble signo que puede tomar m_l

Las funciones que representan a una partícula de masa m que se mueve sobre una *esfera* de radio r en el espacio son los armónicos esféricos y los valores de energía permitidos son $E= l(l+1)\hbar^2/2I$. El módulo del momento angular es $[l(l+1)]^{1/2}\hbar$ y su proyección sobre el eje z es $m_l\hbar$.
a) ¿Cuáles son los números cuánticos que caracterizan a los armónicos esféricos? Indique qué valores puede tomar. Analice cuales son los estados degenerados y por qué.
b) Explique qué entiende por cuantización espacial del momento angular.

Problema 5
Si analizamos el movimiento interno del electrón con respecto al núcleo, las autofunciones que son solución de la ecuación de Schrödinger tienen una componente radial y una angular
a) ¿Cuáles son los números cuánticos que las definen y qué valores pueden tomar?
b) Los autovalores de energía relativa son $E_n = -\mu_{red}\, z^2e^4/32\pi^2\varepsilon_0^2\, \hbar^2n^2$. ¿Cuál es la energía a la que se le asigna valor 0? ¿Porqué los valores son negativos?
c) Realice un gráfico con las energías de las 3 primeras capas indicando los orbitales que incluyen cada una.
d) Represente en un esquema la densidad de probabilidad de los estados |3,0,0> y |2,1,0>
e) ¿Cuántos números cuánticos identifican completamente el estado de un electrón? Explique que indica cada uno.