Fundamentos de Espectroscopia
Departamento de Física – FBCB Primer Parcial 3/10/14

Problema 1
El operador energía (hamiltoniano) que se plantea para una partícula libre moviéndose sin restricciones en el eje x es $\mathscr{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$.
a) Verifique que las funciones de onda $\varphi_1=Ae^{ikx}$ y $\varphi_2=Be^{-ikx}$ son soluciones de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo $\mathscr{H}\varphi= E\varphi$ e indique el autovalor de energía.
b) Verifique que las funciones propuestas son también autofunciones del operador cantidad de movimiento $p=(\hbar/i)d/dx$ ¿cómo interpreta la diferencia entre los valores observables obtenidos para cada caso?
c) Calcule la densidad de probabilidad para $\varphi_1=Ae^{ikx}$ 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) Explique por qué la energía está cuantizada, cuáles son los valores posibles de n y de dónde surge esa restricción.
b) Encuentre la expresión de la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos e indique las variables de las que depende.
c) Realice un gráfico en el que represente los 3 primeros niveles de energía ¿están equiespaciados?
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) Indique cómo es la función de onda y el autovalor de energía para las dos variables, cuales son sus números cuánticos y en qué caso podrían existir estados degenerados.

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) Calcule la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos e indique de que variables propias del sistema depende
b) Grafique los 3 primeros niveles de energía.

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 $\varphi = (1/2\pi)^{1/2}e^{i\, ml\, \phi}$ y sus autovalores de energía son $E= \hbar^2 m_l^2/2I$ donde $I = mr^2$
a) Explique por qué la energía está cuantizada, cuáles son los valores posibles de m_l y de dónde surge esa restricción.
b) Verifique que la función propuesta es también autofunción de la componente z del operador cantidad de movimiento angular $l_z=(\hbar/i)d/d\phi$ e indique el autovalor obtenido (observable).

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) ¿Cuál es el número cuántico que caracteriza la energía? Indique qué valores puede tomar. ¿A partir de qué valor de *l* aparecen los estados degenerados?, plantee un ejemplo.
b) El momento angular está cuantizado en su módulo y en su proyección sobre el eje z, ¿Cuáles son los números cuáticos y que valores pueden tomar?

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. Los autovalores de energía relativa son $E_n = -\mu_{red}\, z^2e^4/32\pi^2\varepsilon_0^2\, \hbar^2 n^2$.
a) Estas funciones se conocen en química como…………. Indique los números cuánticos que los caracterizan, qué valores pueden tomar y que representa cada uno.
b) ¿Cuál es el orbital más estable? ¿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 |1,0,0> y |2,1,0>
e) ¿Cuándo se dice que un electrón "ocupa" un orbital? ¿Cuál es la función de onda completa que lo caracteriza?
f) Si consideramos un átomo con más de un electrón ¿por qué el orbital 2s es más estable que el 2p?