Fundamentos de Espectroscopia

Departamento de Física – FBCB Primer Parcial 06/10/17

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) Se propone la función de onda $\varphi_2=Be^{-ikx}$. Aplique la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo $\mathscr{H}\varphi= E\varphi$ y calcule el autovalor de energía.

b) Calcule la densidad de probabilidad para $\varphi_2=Be^{-ikx}$ ¿Cómo interpreta este resultado?

c) Aplique el operador cantidad de movimiento $p=(\hbar/i)d/dx$ a la función φ_2 y calcule el valor de la cantidad de movimiento.

d) Analice si los resultados obtenidos en b) y c) cumplen con 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 $\varphi_n = (2/L)^{1/2}\text{sen}(n\pi/L)x$ 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) Realice un gráfico en el que represente los 3 primeros niveles de energía ¿están equiespaciados?

c) Encuentre la expresión de la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos e indique las variables de las que depende.

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) Escriba la función de onda y el autovalor de energía para las dos variables.Indique 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) Grafique los 3 primeros niveles de energía. ¿están equiespaciados?

b) Calcule la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos e indique de que variables propias del sistema depende

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) Indique qué valores puede tomar el número cuántico

b) Aplique el operador componente z de cantidad de movimiento angular $l_z=(\hbar/i)d/d\phi$ y calcule el valor de la componente z del momento angular (observable) ¿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 relativo del electrón con respecto al núcleo, las funciones 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) Indique los números cuánticos que caracterizan la componente radial y la componente angular ¿qué valores pueden tomar y qué representa cada uno?
b) Realice un gráfico con las energías de las 3 primeras capas indicando los orbitales que incluyen cada una.
c) ¿Cuál es el orbital más estable? ¿Porqué los valores son negativos?
d) Represente en un esquema la densidad de probabilidad de los estados |2,0,0> y |2,1,0>
e) Escriba la función de onda completa que caracteriza un electrón y los números cuánticos involucrados.