

PROBLEMAS. Principios de Estructura de la Materia - Serie 1

1. Si un electrón, que se mueve en una dimensión, está sujeto a una energía potencial  $V(x,t)$ , el electrón estará descrito por la función  $\Psi(x,t)$ , que es solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x,t)}{dx^2} + V(x)\psi(x,t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \quad (1)$$

Si la energía potencial no depende del tiempo,  $V = V(x)$ , el electrón se puede encontrar en un estado estacionario. La función que describe este estado estacionario es:

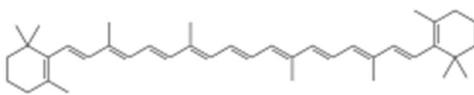
$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (2)$$

Substituya ésta ecuación en (1) y encuentre la ecuación estacionaria, o ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

2. Un electrón en una caja rectangular tridimensional de dimensiones  $a = 5.00 \text{ \AA}$ ,  $b = 3.00 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.00 \text{ \AA}$ , realiza una transición radiativa del menor estado excitado al estado base. Calcule la frecuencia del fotón emitido.

3. Consideremos una caja de potencial en una dimensión. Queremos aplicar este modelo para describir el sistema de electrones  $\pi$  de la molécula  $\beta$ -caroteno:



Haciendo la hipótesis de que cada electrón del sistema de enlaces  $\pi$  conjugados se desplazan libremente en un segmento de longitud  $L$ . El sistema  $\pi$  de la molécula contiene 11 enlaces dobles conjugados y 22 electrones. En el estado fundamental de la molécula tendremos 11 funciones  $\psi_n(x)$  ocupadas, cada una por 2 electrones.

- Estimar el valor de  $L$  para la molécula  $\beta$ -caroteno.
- Cuál sería la longitud de onda (en nm) de la transición electrónica de más baja energía?
- Se sabe que la primera transición electrónica ocurre en  $\lambda = 500 \text{ nm}$ . Compare con el resultado obtenido en b) y explique porqué el modelo propuesto es demasiado elemental.

#### 4. Oscilar Armónico. Vibración de una molécula diatómica.

Consideremos una molécula constituida por dos átomos de masas  $m_1$  y  $m_2$  y supongamos que se pueden desplazar sobre el eje  $x$ . Sean  $x_1$  y  $x_2$  la posición de los átomos al tiempo  $t$  y  $x_{10}$  y  $x_{20}$  las posiciones de equilibrio.

a) Escribir la expresión de la energía del sistema y mostrar que se puede escribir como

$$E = \frac{\mu \dot{x}^2}{2} + \frac{kx^2}{2}$$

$\mu$  es la masa reducida y

$$x = (x_1 - x_{10}) - (x_2 - x_{20})$$

Al estudiar el problema en mecánica cuántica, hay que determinar la expresión del operador asociado y escribir la ecuación de Shrodinger.

La solución de esta ecuación conduce a los siguientes resultados:

- La energía del oscilador está cuantificada y puede tomar los valores

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$$

donde  $n$  es un entero positivo o cero y  $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{\omega}{2\pi}$

donde  $\mu$  es la masa reducida del sistema.

- Las funciones de onda están dadas por

$$\psi_n(x) = N_n H_n(y) e^{-y^2/2}$$

$$\text{con } y = x \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

$H_n(y)$  es un polinomio de Hermite y  $N_n$  una constante de normalización.

Dada la energía de los primeros niveles de vibración de la molécula  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ ?

Datos:  $m_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{Kg}$ ,  $k = 500 \text{ N.m}^{-1}$  (cte. De fuerza del enlace H-Cl),  $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{J.s}$ .

b) ¿cuál es la frecuencia del fotón adsorbido en una transición del nivel  $n=0$  al nivel  $n=1$ ? ¿A qué región del espectro electromagnético corresponde?

- c) La molécula H<sub>2</sub> tiene una vibración a 4401 cm<sup>-1</sup> (inverso de la longitud de onda). El espectro de una molécula constituida de isótopos del H (<sup>1</sup>H, <sup>2</sup>H ó <sup>3</sup>H) tiene una línea en 3112 cm<sup>-1</sup>, de cuál molécula se trata?

5. En el modelo de rotor rígido (sistema de dos partículas fijas unidas por una varilla sin masa a una distancia d) el momento de inercia está dado por

$I = \mu d^2$ , donde  $\mu$  es la masa reducida  
y los niveles permitidos de energía están dados por:

$$E = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}, \quad J = 0,1,2,\dots$$

La transición J = 1 a J = 2 puramente rotacional de <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O ocurre a 230.538 GHz (1 GHz = 10<sup>9</sup> Hz). Encuentre la distancia de enlace de ésta molécula.

6. i) Calcule el valor esperado  $\langle T \rangle$  de la energía cinética del estado base del átomo de hidrógeno. Utilice lo siguiente:

$$\langle T \rangle = \int \psi^* T \psi d\tau = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int \psi^* \nabla^2 \psi d\tau$$

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

$$d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

ii) Compruebe que en efecto  $\langle T \rangle \cong 13.6 \text{ eV}$