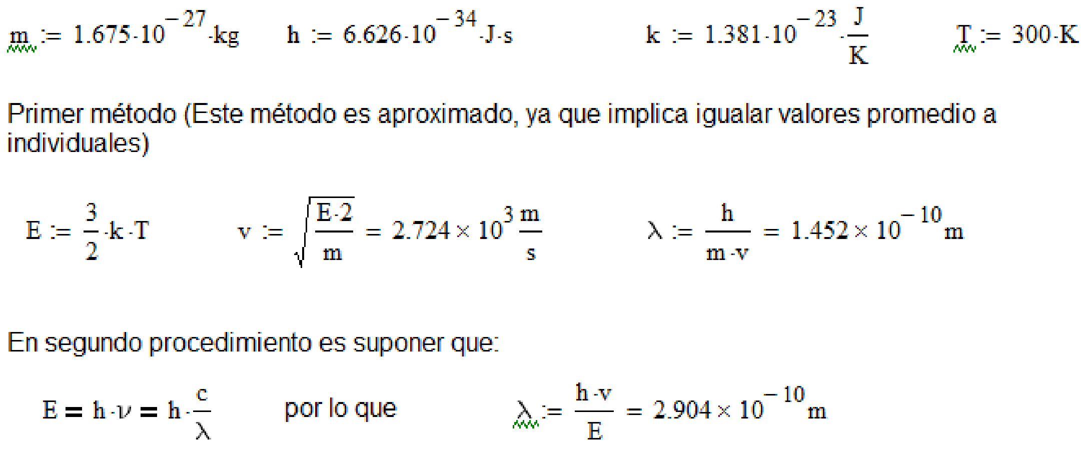
Cuestiones Planteadas en Clase.

Lección 1:

Determina la velocidad y la longitud de onda correspondiente de un neutrón que se encuentra a T = 300K.

Datos: masa (neutrón) = 1.675×10^{-27} kg, h = 6.626×10^{-34} J·s, $k_B = 1.38\times10^{-23}$ J·K^{-1}.

Solución:



$m := 1.675\cdot10^{-27}\cdot kg \qquad h := 6.626\cdot10^{-34}\cdot J\cdot s \qquad k := 1.381\cdot10^{-23}\cdot\frac{J}{K} \qquad T := 300\cdot K$

Primer método (Este método es aproximado, ya que implica igualar valores promedio a individuales)

$E := \frac{3}{2}\cdot k\cdot T \qquad v := \sqrt{\frac{E\cdot2}{m}} = 2.724\times10^{3}\,\frac{m}{s} \qquad \lambda := \frac{h}{m\cdot v} = 1.452\times10^{-10}\,m$

En segundo procedimiento es suponer que:

$E = h\cdot\nu = h\cdot\frac{c}{\lambda}$ por lo que $\lambda := \frac{h\cdot v}{E} = 2.904\times10^{-10}\,m$

Lección 2:

Sean la función $\psi = Ne^{-br}$, y el operador:

$$A = \left[\frac{2}{r} + \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\right]$$

¿Qué valor debe tomar la constante b para que ψ sea función propia del operador A?, y ¿Cuál será en este caso el autovalor correspondiente?

Solución :

$$\frac{d\psi}{dr} = -b\psi \qquad \left[\frac{d}{dr}\psi = N\frac{d}{dr}e^{-br} = -bNe^{-br} = -b\psi \right.$$

$$\downarrow$$

$$r^2\frac{d}{dr}\psi = -b\,r^2\psi$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\psi\right) = -\frac{b}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\psi\right) = -\frac{b}{r^2}\left[2r\psi - b\,r^2\psi\right.$$

$$= -\frac{2b\psi}{r} + b^2\psi$$

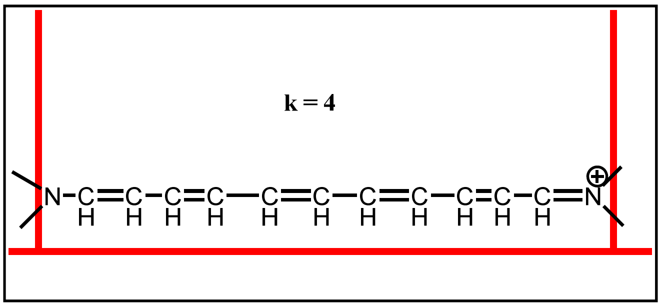
luego

$$A\psi = \frac{2}{r}\psi - \frac{2b}{r}\psi + b^2\psi = \frac{2(1-b)}{r}\psi + b^2\psi$$

Para que $A\psi = cte\,\psi$ se tiene que cumplir que el termino en $1/r$ sea cero ⇒ $1 = b$. En este caso, con $b = 1$

$$\underline{A\psi = b^2\psi = \psi}$$

Lección 3:



Considérese el polieno conjugado que se muestra en la figura, el cual posee 11 átomos de carbono y 2 nitrógenos, siendo su número de electrones π se 14. Utilizando el modelo de la caja de potenciales de paredes infinitas, determinar la energía necesaria para excitar un electrón desde el orbital HOMO al orbital LUMO, expresar la energía en Julios y en nm.
Utilizando los datos de distancia C-C y N-C que se dan en el apéndice 3.1 de la Lección 3, y suponer que en cada nivel pueden situarse dos electrones con spines diferentes.
(El valor experimental es 625 nm)

Solución:

$m = 9'109 \cdot 10^{-31}\ Kgr$ (masa electrón)

$h = 6'626 \cdot 10^{-34}\ J \cdot S$ $\qquad c = 2'998 \cdot 10^{8}\ m/s$

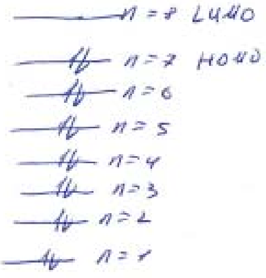
$$D = 10\, d_{c-c} + 2\, d_{c-N} + 2 R_N = 17'8\ \mathring{A} = 1'78 \cdot 10^{-9}\ m.$$

$$n^{\circ}\ e^{-}\ \pi = 11 + 3 = 14\ e^{-}$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m D^2}$$

$$\Delta E = \frac{h^2}{8 m D^2}\left[n^2_{LUMO} - n^2_{HOMO} \right] = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\downarrow$$



$$\lambda = \frac{8 m D^2 \cdot c \cancel{h}}{h^{\cancel{2}} \left[n^2_{LUMO} - n^2_{HOMO} \right]} =$$

$$\lambda = \frac{8 m D^2 \cdot c}{h\,[8^2 - 7^2]} = 6'964 \cdot 10^{-7}\ m = \underline{696'4\ nm}$$

$$\lambda_{exp} = 625\ nm.$$

Lección4

Las siguientes funciones son soluciones del sistema oscilador armónico:

$\psi_0 = C_0 e^{-\beta x^2/2}$ $\qquad \psi_2 = C_2\left(2\beta x^2 - 1\right)e^{-\beta x^2/2}$

Demostrar, utilizando los resultados del problema 4.2, y sin resolver ninguna integral, que estas funciones son ortogonales.

Solución: $\psi_0 = C_0 e^{-\beta x^2/2}$ $\qquad \psi_2 = C_2(2\beta x^2 - 1)\, e^{-\beta x^2/2}$

La función ψ_2 se puede escribir de la siguiente forma.

$$\psi_2 = C_2(2\beta x^2 - 1)\, e^{-\beta x^2/2} = \frac{C_2 C_0}{C_0}(2\beta x^2 - 1)e^{-\beta x^2/2} =$$

$$\psi_2 = \frac{C_2}{C_0}(2\beta x^2 - 1)\,\psi_0$$

luego

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 \psi_2\, dx = \frac{C_2}{C_0}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 (2\beta x^2 - 1)\psi_0\, dx =$$

$$= \frac{C_2}{C_0}\left[2\beta \overset{=\overline{x^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 x^2 \psi_0\, dx} - \overset{=1}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2\, dx}\right] = \frac{C_2}{C_0}\left[2\beta \overline{x}_2 - 1\right]$$

Vimos en el problema 4.2 que para el estado fundamental $\overline{x}_2 = 1/2\beta$, por lo que.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 \psi_2\, dx = \frac{C_2}{C_0}\left[2\beta \cdot \frac{1}{2\beta} - 1\right] = \underline{0}$$

Lección 5

Comprobar que el armónico esférico real:

$$Y_2^{xy} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}} \cdot \mathrm{sen}^2(\theta) \cdot \mathrm{sen}(2\phi)$$

se construye mediante la siguiente combinación de armónicos esféricos:

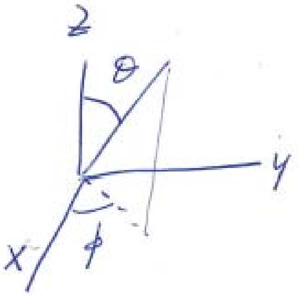
$$Y_2^{xy} = \frac{Y_2^2 - Y_2^{-2}}{i \cdot \sqrt{2}}$$

Solución:

$$Y_2^{xy} = \frac{Y_2^2 - Y_2^{-2}}{i\sqrt{2}} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\frac{\mathrm{Sen}^2(\theta)}{i\sqrt{2}}\left(e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}\right)$$

$$= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\frac{\mathrm{Sen}^2(\theta)}{i\sqrt{2}}\left[\cancel{\cos(2\phi)} + i\,\mathrm{Sen}(2\phi) - \left(\cancel{\cos(2\phi)} - i\,\mathrm{Sen}(2\phi)\right)\right]$$

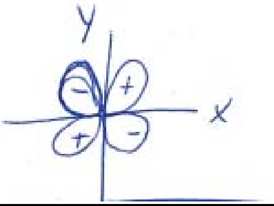
$$= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\frac{2\,\mathrm{Sen}^2(\theta)\,\mathrm{Sen}(2\phi)\,i}{i\sqrt{2}} = \underline{\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2}}\,\mathrm{Sen}^2(\theta)\,\mathrm{Sen}(2\phi)}$$



La función anterior tiene un máximo para:

$$\theta = \pi/2 \quad \rightarrow \mathrm{Sen}^2(2\theta) = 1$$

$$\text{la función para } \phi = \left\{\begin{array}{ll} & \mathrm{Sen}(2\phi) \\ \pi/4 & 1 \\ 3\pi/4 & -1 \\ 5\pi/4 & 1 \\ 7\pi/4 & -1 \end{array}\right. \rightarrow$$



Lección 6

Para un electrón situado en un orbital 1s, determinar la desviación cuadrática media a lo largo de la coordenada r (Δr).

Solución:

$$\overline{r^2} = \int \psi_{1s} r^2 \psi_{1s} d\tau = \frac{4\pi}{a_0^3 \pi} \int_0^\infty r^4 e^{-2r/a_0} dr = \frac{4}{a_0^3} \frac{4!}{(2/a_0)^5} = 3a_0^2$$

$$\overline{r} = \int \psi_{1s} r \psi_{1s} dr = \frac{4\pi}{a_0^3 \pi} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr = \frac{4}{a_0^3} \frac{3!}{(2/a_0)^4} = \frac{3}{2} a_0$$

$$\Delta r = \sqrt{\overline{r^2} - (\overline{r})^2} = \sqrt{3a_0^2 - \frac{9}{4}a_0^2} = \underline{\frac{\sqrt{3}}{2}} a_0$$