Universidad de Los Andes, Facultad de Ciencias, Física Moderna 2.

Prof. **Jesús Marquina.**

Fecha límite de entrega: **02/12/2013.**

Tarea 2

1. Par un estado excitado del hidrógeno, demuestre que el ángulo minímo que puede formar el vector cantidad de movimiento angular $\vec{L}$ con el eje z es (2 ptos.)

$$\theta_{mín} = arccos\left(\frac{n-1}{\sqrt{n\,(n-1)}}\right)$$

¿Cuál es la ecuación correspondiente para θ_{max}, el mayor ángulo posible entre $\vec{L}$ y el eje z?

2. Para el átomo de hidrógeno demostrar que el número de estados degenerados (funciones de onda degeneradas $\psi_{n\,l\,m_l}$) para un valor determinado de n es n^2. (2 ptos.)

3. Calcular la probabilidad radial de que el electrón en el estado fundamental de un átomo de hidrógeno se encuentre en la región $0 < r < a_0$. (2 ptos.)

4. Muestre que las funciones de onda para un electrón en el estado 1s y 2s en el hidrógeno (Z=1), esto es, ψ_{100} y ψ_{200} satisfacen la ecuación de Shcrödinger radialmente simétrica, (4 ptos.)

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR}{dr}\right] + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - E_p\right)R = \frac{l(l+1)}{r^2}R$$

o

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \left(E - E_p\right)R = \frac{l(l+1)}{r^2}R$$

con $E_p = Zke^2/r$

5. Demostrar que la masa reducida es menor que cualquiera de las masas para una molécula diatómica y calcular su valor para a) H_2, b) N_2, c) CO y d) HCL. Expresar los resultados en unidades de masa unificada. (2 ptos.)

6. De los siguientes datos, encontrar la energía necesaria para disociar una molécula de KCl en un átomo neutro de K y un átomo neutro de Cl. El primer potencial de ionización (o energía de ionización) del K es 4,34 eV; la afinidad electrónica del Cl es 3,82 eV; la separación de equilibrio (r_0) del KCl es 2,79 Å. (Sugerencia: demostrar que la energía potencial mutua del K^+ y Cl^- es $-(14,4/r)$ eV si r está dado en Angstroms). (2 ptos.)

7. Empíricamente, la energía potencial del NaCl se puede escribir por (2 ptos.)

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + Ae^{-r/\rho}$$

donde r es la separación internuclear. La separación de equilibrio (r_0) de los núcleos es 2,5 Å y la energía de disociación es de 3,6 eV.

   a) Calcular las constantes A y ρ.
   b) Graficar a escala (utilice un aplicación para hacer el gráfico) en una sola gráfica, E_p y cada uno de los términos de E_p (tres curvas).

8. Verifique que los orbitales moleculares para una molécula de hidrógeno (4 ptos.)

$$\psi_b\left(\vec{r}\right) = c_b\left[\psi_{1s}\left(\vec{r} - \vec{R}_1\right) + \psi_{1s}\left(\vec{r} - \vec{R}_2\right)\right],$$

$$\psi_a\left(\vec{r}\right) = c_a\left[\psi_{1s}\left(\vec{r} - \vec{R}_1\right) + \psi_{1s}\left(\vec{r} - \vec{R}_2\right)\right],$$

están normalizadas con las constantes de normalización dadas por

$$c_{b,a} = \left\{2\left[1 \pm \left(1 + d/a_0\right)e^{-d/a_0}\right]\right\}^{-1/2}$$

con $d = |\vec{R}_2 - \vec{R}_1|$ la separación entre los dos núcleos localizados en $\vec{R}_1$ y $\vec{R}_2$, respectivamente.