DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA TIERRA Y DE LAVIDA
GUIA PARA EXAMEN DEPARTAMENTAL
QUIMICA CUÁNTICA

Centro Universitario de los Lagos
Centro Científico y Cultural de la Región / UdeG

1. El oído humano es sensible a ondas sonoras con frecuencias comprendidas entre 15 Hz y 20 kHz. La velocidad del sonido en el aire es 343 m/s. Calcular las longitudes de onda correspondientes a estas frecuencias.
2. La línea más intensa del espectro del átomo de sodio tiene una longitud de onda de 589 nm. Calcular el correspondiente número de onda y la energía de la transición implicada en electronvoltios por fotón, y en kJ/mol.
3. Calcular la longitud de onda máxima de un fotón que pueda producir la reacción:

$$N_{2\,(g)} \rightarrow 2N_{(g)} \qquad \Delta H = +225\ \text{kcal/mol}$$

4. La reacción fotoquímica $NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O$ es una de las fuentes de átomos de oxígeno (y por tanto de ozono) más importante en la atmósfera terrestre. La energía de disociación es 306 kJ/mol. Encontrar la longitud de onda de un fotón capaz de producir dicha reacción.
5. La frecuencia umbral para la emisión fotoeléctrica del cobre es $1.1\text{x}10^{15}$ s^{-1}. ¿Cuál será la energía máxima (en electronvoltios) de los fotoelectrones emitidos cuando la luz de frecuencia $1.5\text{x}10^{15}$ s^{-1} incide sobre una superficie de cobre?.
6. El potencial de extracción del sodio es 2.3 eV: a) ¿cuál será la máxima longitud de onda de la luz, que producirá emisión de fotoelectrones en el sodio? y b) ¿cuál será la energía cinética máxima de los fotoelectrones si luz de 2000 Å incide sobre una superficie de sodio?.
7. La función trabajo del K es 2.2 eV y la del Ni 5.0 eV. (a) Calcular las frecuencias y longitudes de onda umbral para estos dos metales. (b) ¿Dará lugar la luz ultravioleta de longitud de onda 400 nm al efecto fotoeléctrico en el K? ¿Y en el Ni? (c) Calcular la máxima energía cinética de los electrones emitidos en (b).
8. Cuando se ilumina una cierta superficie metálica con luz de diferentes longitudes de onda y se miden los potenciales que detienen los fotoelectrones, se obtienen los valores que se muestran en la siguiente tabla:

λ (10^{-7}m)	3.66	4.05	4.36	4.92	5.46	5.79
V(V)	1.48	1.15	0.93	0.62	0.36	0.24

Representando el potencial en función de la frecuencia, determinar: (a) la frecuencia umbral, (b) el potencial de extracción del metal, y (c) la constante de Planck.

9. Cuando cierto metal se irradia con luz de frecuencia $3.0\text{x}10^{16}$ s^{-1}, los fotoelectrones emitidos tienen una energía cinética doce veces mayor que los fotoelectrones emitidos cuando el mismo metal se irradia con luz de frecuencia $2.0\text{x}10^{16}$ s^{-1}. ¿Cuál será la frecuencia umbral del metal?.

10. En un tubo de rayos X donde los electrones se aceleran con un potencial de 5000 V, la mínima longitud de onda de los rayos X producidos es 248 pm. Estimar el valor de la constante de Planck.
11. Calcular la frecuencia hacia la cual convergen todas las líneas espectrales de la serie de Lyman. ¿Cuál será la longitud de onda y la energía de esta radiación?.
12. Calcular la longitud de onda en Angstrom y la frecuencia en s^{-1} de la primera línea de la serie de Balmer.
13. Calcular el potencial de ionización del átomo de hidrógeno cuando el electrón ocupa la órbita con número cuántico principal igual a 5.
14. Calcular la longitud de onda de De Broglie asociada a: (a) un electrón con 15 keV de energía cinética, (b) un protón con 15 keV de energía cinética, (c) una molécula de SF_6 a una velocidad de 1 m/s, y (d) un objeto de 1 kg a una velocidad de 1 m/s.
15. Calcular el módulo de (a) -2, (b) 3-2i, (c) cos θ +i sen θ, (d) y e iax.
16. Probar que (fg)* = f*g* donde f y g son cantidades complejas.
17. Verificar que si es una solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, entonces es también solución siendo una constante.
18. Comprobar que las funciones son soluciones de la ecuación de Schrödinger monodimensional dependiente del tiempo de una partícula libre. Suponiendo que es la longitud de onda de De Broglie, expresar en función del momento lineal p.
19. Si la posición de un electrón se mide con una precisión de ±0.001Å ¿Cuál será la máxima precisión para el momento?
20. Un átomo sufre una transición desde un estado excitado con un tiempo de vida de 1 ns al estado fundamental, y emite un fotón con una longitud de onda de 600 nm. Calcular la incertidumbre en la energía del estado excitado.
21. Hallar la longitud de onda de la luz emitida cuando una partícula de 1.0 x 10-27g en una caja monodimensional de 30 nm pasa del nivel n=2 al nivel n=1.
22. Calcular la energía en electronvoltios (eV) de los niveles n=1, 2 y 3 de un electrón en una caja de potencial monodimensional de longitud a = 560 pm.
23. Para una partícula en el estado estacionario n de una caja monodimensional de longitud a, encontrar la probabilidad de que la partícula esté en la región $0\leq x \leq a/4$.
24. Para el estado fundamental de una partícula en una caja monodimensional de longitud a, encontrar la probabilidad de que la partícula esté entre ±0.001 a del punto a/2.
25. Para el estado estacionario de número cuántico n de la partícula en una caja, escribir una expresión para la probabilidad de que la partícula se encuentre entre a/4 y a/2.
26. Para un electrón en una determinada caja monodimensional, la transición observada de menor frecuencia es 2.0×10^{14} s . Calcular la longitud de la caja.
27. Teniendo en cuenta las condiciones de continuidad que la función de onda debe satisfacer, que pasaría a los niveles de energía de una partícula en una caja monodimensional si la longitud de la caja cambia de a a a/j (j= 2, 3, …).
28. Encontrar las funciones de onda y las correspondientes energías para los estados estacionarios de una partícula en una caja de potencial tridimensional de lados a, b y c.

29. Para una partícula en una caja cúbica de lado a: (a) ¿Cuántos estados tienen energías en el rango de 0 a $16h^2/8ma^2$? (b) ¿Cuántos niveles de energía caen en ese rango?
30. Para una partícula en una caja tridimensional de lados a, b y c con a ≠ b ≠ c, hacer una tabla de nx, ny nz, las energías y las degeneraciones de los niveles con números cuánticos en el rango de 1 a 5 (Tomar $a^2/b^2 = 2$).
31. Comprobar que la función es solución de la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico. Relacionar con la constante de fuerza del oscilador y la masa de la partícula, y calcular la energía correspondiente a esa solución.
32. La molécula HI tiene una constante de fuerza de enlace de 314 Nm . Calcular para 1H 127I y 2D 127I: (a) La frecuencia vibracional clásica en s-1, (b) el número de onda correspondiente a la transición de n=0 a n=1 en el espectro vibracional.
33. Calcular la frecuencia de la radiación emitida cuando un oscilador armónico de frecuencia 6.0 x 1013 s-1 salta del nivel v=8 al v=7.

34.- Dada la función de onda normalizada para una partícula que se mueve en una dimensión

$$\phi(x) = (4\alpha^3/\pi)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2}$$

Comprobar si existe algún valor de α para el cual esta función es solución de la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico monodimensional de masa m y constante de fuerza k.

Obtener la densidad de probabilidad en $x = 0$.

Calcular las posiciones de los máximos de la densidad de probabilidad en función de α.

35.- Un oscilador armónico tridimensional tiene un potencial $V = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2 + \frac{1}{2}k_z z^2$, donde las tres constantes de fuerza no son necesariamente iguales. Escribir una expresión para los niveles de energía de este sistema ¿Cuál es el punto cero de energía?

36.- Expresar $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ en coordenadas polares.

37.- Mostrar que si $\Phi = N\, e^{im\phi}$ es una función definida entre 0 y 2 π, la constante de normalización N vale $(2\pi)^{-1/2}$.
38.- Calcular la energía electrostática de dos electrones separados 3.0 Å en el vacío. Expresar la respuesta en Julios, ergios y eV.
39.- ¿Existe una atracción gravitatoria entre el electrón y el protón en el átomo de hidrógeno? Si existe ¿por qué no se tiene en cuenta en el Hamiltoniano? Hacer un cálculo para justificar la respuesta.
40.- a) Supongamos $z_1 = a_1 + ib_1$ y $z_2 = a_2 + ib_2$, donde $i = \sqrt{-1}$ y los coeficientes a y b son reales. Si $z_1 = z_2$, indicar que condiciones tienen que cumplir los coeficientes a y b.

b) Verifique que para la función $\Phi(\phi) = N\, e^{im\phi}$ el requisito $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ conduce a la condición de que m sea un número entero.

41.- Usar la energía de ionización del H para predecir la de los iones He^{+}, Li^{2+} y U^{91+}.
42.-Calcular la longitud de onda del fotón emitido cuando un electrón salta del nivel $n = 3$ al $n = 2$ de un átomo hidrogenoide. Indicar para que estados es posible este salto.
43.- Ya que los átomos de H y D poseen distinta masa reducida, existirán pequeñas diferencias de energías entre sus niveles. Calcular los potenciales de ionización y la longitud de onda de la primera línea de la serie de Balmer para los dos isótopos.
44.- Un átomo hidrogenoide tiene una serie de líneas espectrales a 26.2445, 19.4404, 17.3578 y 16.4028 nm. Calcular la carga nuclear del átomo y describir a qué transiciones corresponden cada una de las líneas espectrales.
45.- ¿Cuáles de las siguientes transiciones están permitidas en el espectro electrónico de un átomo hidrogenoide?

(a) $2s \to 1s$ (b) $2p \to 1s$ (c) $3d \to 1s$ (d) $3d \to 3p$

46.- Demostrar que el máximo de la función de distribución radial para el estado fundamental de un átomo hidrogenoide está en $r = a_0/Z$. Encontrar los valores numéricos para C^{5+} y B^{3+}.
47.- Calcular la probabilidad de que el electrón en el estado 1s del átomo de hidrógeno esté a una distancia del núcleo entre 0 y 2.0 Å
48.- Comprobar que la constante de normalización N del orbital 1s:
$\phi_{1s} = N \exp[-Zr/a_0]$ es $N = \left[\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right]^{1/2}$
49.- La función de onda normalizada del orbital $1s$ de un átomo hidrogenoide es:

$$\phi_{1s} = (Z^3/\pi a_0^3)^{1/2} e^{-Zr/a_o}$$

Determinar el valor medio de la distancia del núcleo al electrón para el orbital 1s del átomo de H y del ion He^+.

Comparar los resultados del apartado anterior con el valor del máximo de la función de distribución radial.

Determinar el valor medio de la energía potencial en ambos sistemas.

50.- Dado el siguiente orbital del átomo de hidrógeno:

$$\psi = N\,r\,e^{-\frac{r}{2a_o}}\,\cos\theta$$

Encontrar sus números cuánticos y decir de que orbital se trata.

Usando los resultados del apartado anterior, decir cuánto vale el módulo del momento angular del electrón cuando está en este estado.

Decir cuánto vale la proyección sobre el eje z del momento angular del electrón cuando está en este estado.

Encontrar sus planos nodales.

Comprobar que su constante de normalización vale $N = \left(\frac{1}{32\pi a_o^5}\right)^{\frac{1}{2}}$

Calcular el valor más probable de la distancia entre el electrón y el núcleo.

Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $r = 0$ y $r = 4a_o$.

Calcular el valor medio de r y de la energía potencial.

Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $\theta = 0$ y $\theta = 10^o$.

Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $\theta = 170^o$ y $\theta = 180^o$.

Calcular la probabilidad de hallar el electrón entre los valores de $\theta = 80^o$ y $\theta = 100^o$.

Evaluar la densidad de probabilidad en los puntos $(x = 0, y = 0, z = 2a_0)$ y $(x = a_0, y = a_0, z = 0)$.

51.- Comprobar que la función $f(r,\theta) = Nr\exp[-Zr/2a_0]\cos\theta$ es solución de la ecuación de Schrödinger para un átomo hidrogenoide y obtener la energía de esta función.

52.- Establecer si cada una de estas funciones es simétrica, antisimétrica o ni una cosa ni la otra

(a) $f(1)g(2)$ (b) $g(1)g(2)$ (c) $f(1)g(2) - g(1)f(2)$ (d) $r_1^2 - 2r_1r_2 + r_2^2$ (e) $(r_1 - r_2)e^{-br_{12}}$

donde f y g son funciones arbitrarias de las coordenadas de las partículas idénticas 1 y 2, r_1, r_2 son las distancias de las partículas al núcleo y r_{12} la distancia entre las dos.

53.- Tomando

$$\Psi(1,2) = \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_B(1) \\ \psi_A(2) & \psi_B(2) \end{vmatrix}$$

demostrar que

el intercambio de 2 columnas cambia el signo de Ψ,

el intercambio de 2 filas cambia el signo de Ψ,

los dos electrones no pueden estar en el mismo espín-orbital.

54.- Mostrar que la siguiente función de onda para el átomo de helio es antisimétrica con respecto al intercambio de los dos electrones

$$\Psi(1,2) = \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) \end{vmatrix}$$

55.- Los primeros potenciales de ionización del Na, K y Rb son 5.138, 4.341 y 4.166 eV, respectivamente. Suponiendo que el nivel de energía del electrón mas externo puede representarse por la energía de los orbitales hidrogenoides con una carga nuclear efectiva Z_{ef}, y que los orbitales importantes son los 3s, 4s y 5s, respectivamente, calcular Z_{ef} para estos átomos
56.- Escriba el hamiltoniano para el movimiento interno del átomo de Li.
57.- Dados los orbitales atómicos $1s$ y $2s$ del átomo de Be, construir el determinante de Slater para el estado fundamental.
58.- Deducir el término espectral para el estado fundamental correspondiente a las configuraciones $np^1\, n'p^1$, ns, np^5, $ns\, nd$, np^2, np^3, nd^2, teniendo en cuenta las reglas de Hund.
59.- Deducir el término espectral para el estado fundamental de los átomos de He, Li, Be, B, C, N, O y F.
60.- Deducir los términos espectrales posibles de las configuraciones:

$1s2s$ del átomo de He

$1s2p$ del átomo de He

$1s^22p$ del átomo de Li

$1s^22s2p$ del átomo de Be