

Tema 2: Aplicaciones de la Teoría Cuántica

1. Escriba la expresión de la energía y de la función de onda para los dos primeros niveles de una partícula en una caja unidimensional.
2. Calcule las diferencias de energías en joules, kilo joules por mol, electronvoltios y centímetros recíprocos entre los niveles a) $n=3$ y $n=1$, b) $n=7$ y $n=6$ para un electrón en una caja que tiene 1,0 nm de longitud.
3. Calcule la separación entre los dos niveles inferiores de una molécula de O_2 en un recipiente unidimensional de longitud 5,0 cm. ¿a qué valor de n la energía de la molécula alcanzará $\frac{1}{2} kT$ a 300 K y cuál será la separación entre dicho nivel y uno inmediatamente inferior?
4. Calcule la probabilidad de que una partícula sea encontrada entre 0,65 L y 0,67 L en una caja de longitud L cuando a) $n=1$, b) $n=2$. Considere la función de onda constante en dicho intervalo.
5. Escriba las funciones de onda y la expresión de la energía para una partícula en una caja bidimensional de longitudes L en la dirección x y L en la dirección y en los siguientes casos: a) $n_1=2$ y $n_2=3$ y b) $n_1=3$ y $n_2=2$.
6. Escriba la forma general de la función de onda que describe el movimiento vibracional de una partícula y la expresión final para los primeros tres niveles vibracionales.
7. Calcule la energía del punto cero de un oscilador armónico consistente en una partícula de masa $5,16 \times 10^{-26}$ kg y constante de fuerza 285 N m^{-1} .
8. Para un oscilador armónico de masa efectiva $2,88 \times 10^{-25}$ kg la diferencia de energía entre niveles adyacentes es 3,17 zJ. Calcule la constante de fuerza del oscilador.
9. Escriba la forma general de la función de onda que describe el movimiento rotacional de una partícula en tres dimensiones y la expresión final para los niveles con $\ell=0$ y $\ell=1$. Escriba las expresiones de energía correspondientes a las funciones de onda escritas.
10. Calcule el momento de inercia de: a) $H^{35}Cl$, b) $H^{37}Cl$, $D^{35}Cl$. Todas las moléculas poseen distancias de equilibrio de 1,275 Å. Calcule la energías de los primeros tres niveles rotacionales para $H^{35}Cl$ y $D^{35}Cl$. Tenga en cuenta que $I=\mu r^2$, donde $\mu=m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$
11. El monóxido de carbono absorbe energía en la región de microondas del espectro electromagnético a $1,153 \times 10^5$ MHz. Esta absorción corresponde a la diferencia de energía entre los dos primeros niveles rotacionales. Calcule la distancia internuclear y el momento de inercia del monóxido de carbono.