

---

## Kimika Fisikoa II. Praktiak I.

---

Ion Mitxelena, David de Sancho, Txema Mercero,  
Xabier Lopez

2019.eko azaroaren 6

### 1 Partikula bat Kaxa batean

#### 1.1 Energia.

- Kalkula ezazu  $n=1 \rightarrow n=2$  trantsizioaren energia. Nola aldatzen da energ a hau  $L$ -rekin? Irudika ezazu. Ze ondorio atera ditzakezu?
- Azter itzazu  $(5,3,3)$ ,  $(3,5,3)$ ,  $(3,3,5)$  egoeren energiak,  $L=10$  a.u.-tako kubo batean gaudenean. Energiak kalkulatu baino lehen, zeozar aurrean zenezake? Zein dira egoera hauen energiak (a.u.-etan)
- Kubo bat beharrian,  $L_x=L_y \neq L_z$  kaxa batean, zein izango dira aurreko egoeren energiak,  $L_x=10$  eta  $L_z=12$  izanda? Konparatu energia aurreko kasuarekin.

#### 1.2 Irudikatu honako egoerak:

- $\psi(3)$ ,  $\psi(50)$  eta  $\psi(3)^2$  Zer ikusi daiteke kasu bakoitzean?
- Irudikatu  $\psi(2, 1, 1)$  egoera. Zer gogoraerazten dizu emaitzak? Eztabaidatu.
- Zein da aurreko egoera bakoitzaren energia,  $L=10$  a.u. aldeko kubo batean bagaude?

## 2 Hidrogeno Atomoa

### 2.1 Energia Potentziala

- Zein da energia potentziala  $r=2.4$  a.u. denean?
- Irudikatu ezazu  $V(r)$   $r \in \{0..8\}$  balio tartearentzat, eta energia  $\{-5,0\}$  tartean, unitate atomikoetan. Eztabaidatu grafika.

### 2.2 Irudikatu $d_{xz}$ orbitala 2D eta 3D-tan.

- Eztabaidatu ikusten duzuna  $n=3$  eta  $n=5$  denean.
- Zein dira Orbital hauei dagozkien zenbaki kuantiko guztiak?

### 2.3 Egin ditugun hurbilketekin, zer gertatuko litzateke Deuterio atomo bat izango bagenu? Zein izango litzateke bere energia?

### 2.4 Zein izango da $\text{He}^+$ katioiaren energia? Kalkula genezake egindako hurbilketekin?