Ejercicios Teoría Atómica

1. Un electrón se encuentra confinado en una caja de potencial de 1,0 Å. Calcule la longitud de onda del fotón emitido en la transición entre los niveles n=1 y n=2.

- Demuestre que la probabilidad de encontrar simultáneamente la partícula en un pozo de potencial unidimensional en los niveles n=1 y n=2 es cero.
- Para una partícula en un pozo de potencial unidimensional, determine la probabilidad de encontrar la partícula en el cuarto izquierdo de la caja. ¿Para qué valor de n es máxima dicha probabilidad? ¿Cuál es el valor para $n \rightarrow \infty$?

El caroteno es un polieno lineal que contiene 22 átomos de carbono conjugados separados por una distancia media de 140 pm. Los electrones en este tipo de sistema se pueden considerar, en una aproximación cruda al problema, como partículas en una caja unidimensional en donde cada estado hasta el n=11 se encuentra ocupado por 2 electrones. Calcule: a) la diferencia de energía entre el estado fundamental de la molécula y el primer estado excitado, en el que un electrón ha pasado desde el nivel n=11 hasta el nivel n=12; b) la frecuencia de la radiación requerida para producir dicha transición.

Sol: a)
$$1.6 \cdot 10^{-19}$$
 J; b) $2.4 \cdot 10^{14}$ s⁻¹

5. Dada la parte radial y la parte angular para la función de onda que representa un orbital 2p_z:

$$R(r) = C r e^{-\frac{r}{2a_0}}$$
$$Y(\theta, \varphi) = B \cos \theta$$

- a) Determine el valor de r para el cual se obtiene el máximo de la curva de distribución radial.
- b) Calcule los valores de θ para los cuales la probabilidad de encontrar el electrón es cero.

Sol: a) r=
$$4a_0$$
. b) $\theta = \pi/2$ (plano nodal)

- Sabiendo que la energía de ionización del átomo de Li es 5,39 eV, calcule la carga nuclear efectiva del electrón 2s en dicho átomo.
- Determine la primera energía de ionización del átomo de nitrógeno y compárela con el valor experimental de 1402 kJ/mol.
- 8. Compruebe que en el átomo de potasio (Z=19), la carga nuclear efectiva sobre el electrón 4s es superior a la del electrón 3d.