

# Física Contemporánea

## Guía 1 – 2024

### Física Molecular – Estructura Molecular

**Problema 1.** Evalúe la energía de los estados ligante y antiligante de la molécula de hidrógeno ionizada ( $\text{H}_2^+$ ) en el modelo LCAO, utilizando orbitales atómicos hidrogenoides  $1s$ .

Para evaluar las integrales, en este problema es conveniente hacer uso de coordenadas elipsoidales  $(u, v, \phi)$ :

$$u = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad v = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad dV = \frac{1}{8}R^3(u^2 - v^2)du dv d\phi$$

con  $1 \leq u < \infty$ ,  $-1 \leq v \leq 1$  y  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .  $r_1$  y  $r_2$  son las distancias desde cada uno de los protones al electrón,  $R$  es la separación entre ambos protones y  $dV$  es el elemento de volumen.

Grafique la energía en función de la separación entre protones.

Determine la separación de equilibrio y la profundidad del potencial.

**Problema 2.** Encuentre la constante de normalización de la función de onda electrónica del estado fundamental de la molécula de hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) en el modelo de Heitler–London.

**Problema 3.** Un método alternativo al de Heitler–London para describir el estado electrónico de la molécula  $\text{H}_2$  es el de orbitales moleculares. Este método considera que dos electrones, de espín opuesto, se encuentran en un mismo estado del tipo  $\psi_+$  de la molécula  $\text{H}_2^+$ .

- a) Mostrar que la función de onda es antisimétrica.
- b) Evalúe la constante  $\gamma$  que determina la fracción de estructura iónica propuesta por esta función.
- c) ¿Cuál es la probabilidad de que ambos electrones residan en el mismo núcleo en este modelo?

**Problema 4.** En la molécula  $\text{H}_2^+$  una porción  $\delta e$  de la carga electrónica se encuentra en la región media entre los dos protones. En base a un modelo simple, clásico, ¿cuál debe ser  $\delta e$  para mantener ligado al sistema?

**Problema 5.** La energía del estado fundamental del  $\text{H}_2^+$  respecto al sistema  $\text{H}$ , en su estado fundamental, y  $\text{H}^+$  a distancia infinita es  $-2,65 \text{ eV}$ .

- a) Calcular la energía del  $\text{H}_2^+$  respecto al sistema  $\text{H}^+ + \text{H}^+ + e$ , a distancia infinita.

- b) Calcular la energía del sistema  $\text{H}_2^+ + e$  a separación infinita respecto al sistema  $\text{H} + \text{H}$ , también a distancia infinita y con ambos átomos en su estado fundamental.
- c) Calcular la energía de ionización del  $\text{H}_2$  si la energía de disociación de esta molécula en el sistema  $\text{H} + \text{H}$ , en su estado fundamental, es 4,48 eV.

**Problema 6.** Una expresión fenomenológica para la energía potencial de una molécula de haluro alcalino tiene la siguiente forma

$$V(R) = \alpha \exp(-aR) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

Datos espectrales proveen valores de la separación de equilibrio  $R_0 = 1,56 \text{ \AA}$  y de la curvatura de la energía potencial  $K = d^2V/dR^2|_{R=R_0} = 248 \text{ J/m}^2$ , para la molécula LiF.

- a) Encuentre la energía para separar la molécula LiF en los iones  $\text{Li}^+$  y  $\text{F}^-$  a distancia infinita.
- b) La energía de ionización del Li es 5,4 eV y la afinidad electrónica del F es 3,4 eV. Encuentre la energía de disociación de la molécula LiF.

**Problema 7.** La función de onda que describe el orbital ligante de la molécula LiF puede expresarse de la siguiente forma

$$\Psi(1, 2) = \left\{ A \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{2s}(1)\phi_{2p_z}(2) + \phi_{2s}(2)\phi_{2p_z}(1)] + B\phi_{2s}(1)\phi_{2s}(2) + C\phi_{2p_z}(1)\phi_{2p_z}(2) \right\} \chi_S(1, 2)$$

Los orbitales atómicos  $\phi_{2s}$  y  $\phi_{2p_z}$  corresponden a los átomos Li y F, respectivamente.  $\chi_S(1, 2)$  representa el estado de espín singlete.

- a) Verifique que  $\Psi(1, 2)$  está normalizada si  $A^2 + B^2 + C^2 = 1$ .
- b) Encuentre una expresión para el momento dipolar eléctrico  $p$  en término de los parámetros  $A$ ,  $B$  y  $C$ .
- c) El valor medido de  $p$  para LiF es  $p = 0,85eR$ , siendo  $R$  la separación de equilibrio entre Li y F. A partir de este dato experimental determine valores para los parámetros  $A$ ,  $B$  y  $C$  de la función de onda. Discuta la relación entre ligadura iónica y covalente en LiF.

**Problema 8.** Considere un potencial de Lennard-Jones del tipo 12-6:

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

- a) Encontrar la profundidad del pozo de potencial y la separación entre átomos en términos de los parámetros  $\varepsilon$  y  $\sigma$  del potencial.
- b) Para el caso de Xe, los parámetros del potencial son  $\varepsilon = 1,94 \times 10^{-2}\text{eV}$  y  $\sigma = 0,407\text{nm}$ . Encuentre la separación de equilibrio y la temperatura de la energía térmica equivalente a la profundidad del pozo de potencial para el Xe.

**Problema 9.** Analizar la estructura de la molécula de amoníaco,  $\text{NH}_3$ .