

Ejercicios

1. La energía potencial, $E(R)$, de la molécula de $^{35}\text{Cl}_2$ se puede expresar, en un pequeño rango en torno a la distancia de equilibrio, como una parábola $E(R) = A + BR + CR^2$, donde R es la distancia internuclear, $A = 6.89816 \times 10^{-18} \text{ J}$, $B = -6.535222 \times 10^{-8} \text{ J m}^{-1}$ y $C = 164.3667 \text{ J m}^{-2}$.
 - (a) Determina la distancia de equilibrio, R_e , que corresponde al mínimo de la parábola. Expresa su valor en Å. Ten cuidado con las cifras significativas en éste y en los siguientes apartados.
 - (b) Dibuja esta parábola y su primera derivada $E'(R) = dE(R)/dR$.
 - (c) Determina la curvatura de la función $E(R)$ en el mínimo, $k_e = (d^2 E/dR^2)_{R=R_e}$, y la energía en el mínimo $E(R = R_e)$.
 - (d) La masa reducida de una molécula diatómica AB viene dada por $\mu = m_A m_B / (m_A + m_B)$, donde m_A y m_B son las masas de sus correspondientes núcleos. Calcula μ para la molécula $^{35}\text{Cl}_2$ y exprésala en unidades atómicas de masa y en kg. La masa del isótopo ^{35}Cl es $34.96885271 \text{ g/mol}$.
 - (e) Calcula la frecuencia de vibración fundamental, $\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k_e/\mu}$, y exprésala en Hz.
 - (f) Convierte ν_e al número de ondas correspondiente, expresado en cm^{-1} .
2. Una forma más apropiada de representar aproximadamente el potencial nuclear de una molécula

diatómica es el potencial de Morse:

$$E(R) = D \left[1 - e^{\beta(R-R_e)/R_e} \right]^2.$$

- (a) Dibuja la forma de esta función. (b) Examina su comportamiento en el límite $R \rightarrow \infty$. (c) Determina la distancia de equilibrio, R_e , la constante de fuerza o curvatura en el mínimo, k_e , y la energía de disociación espectroscópica, $D_e = E(R \rightarrow \infty) - E(R_e)$.
3. Examina la función $x(t) = (e^{kt} - 1)/(a + be^{kt})$. (a) Dibuja la función para $t > 0$ si $a = 1$ y $b = 0.01$ y muestra que su comportamiento es el de una sigmoide. (b) Dibuja también $\dot{x}(t) = dx/dt$ y $\ddot{x}(t) = d^2x/dt^2$ en las mismas condiciones. (c) Encuentra, en función de a y b , la posición t_* a la que se encuentra el punto de inflexión de la curva, caracterizado porque $\ddot{x}(t_*) = 0$.
4. Ajusta, empleando el método de mínimos cuadrados, las siguientes funciones a los datos que figuran en la tabla adjunta. Las funciones son: (a) una línea recta $y = a + bx$; (b) una función exponencial $y = ae^{bx}$; (c) una función potencial $y = ax^b$; (d) una función logarítmica $y = a + b \ln x$; y (e) una función lineal inversa $y = a + b/x$.

x	474,0	435,9	402,3	376,9	329,1	290,0	250,2	206,0
y	1 336,0	1 439,0	1 560,6	1 678,9	1 987,8	2 336,9	2 741,6	3 237,4

5. Encuentra el potencial de Morse, así como los polinomios de grado 2, 3, 4 y 6 que mejor se ajustan, en el sentido de los mínimos cuadrados, a los datos siguientes $E(R)$:

R	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	2.5
E	0.78255	0.40335	0.16446	0.03776	0.00000	0.03196	0.11784	0.24465	0.40177	2.18814

6. La elongación de un movimiento armónico simple viene dada por cualesquiera de las partes real o imaginaria de $x(t) = x_0 e^{i(\omega t + \phi)}$, donde $x_0 = |x|$ es la amplitud, $\omega = 2\pi\nu$ la frecuencia angular y ϕ el ángulo de fase.
- Dibuja frente al tiempo las partes real e imaginaria de $x(t)$ y comprueba que ambas son equivalentes salvo un desfase de $\pi/2$.
 - Examina el comportamiento de una onda formada por la superposición de dos ondas simples, $x_1(t)$ y $x_2(t)$, de igual amplitud y frecuencia entre las que existe una diferencia de fase $\delta = \phi_1 - \phi_2$. Determina la amplitud de la onda resultante en función de δ . Examina, en particular, los casos $\delta = \{0, \pi/4, \pi/2, \pi, 3\pi/2\}$.
 - Considera el movimiento en una dimensión de una partícula clásica de masa m sometida a una fuerza recuperadora elástica $f = -kx$, donde k es la constante de fuerza o constante de muelle. Muestra que la partícula describe un movimiento armónico simple en el que $\omega = \sqrt{k/m}$.
 - Calcula las energías cinética y potencial de la partícula del apartado anterior, represéntalas tanto frente a t como frente a x , y demuestra que su suma es constante como exige el principio de conservación de la energía.