VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA
Plaza de los Caídos s/n 37008 - Salamanca
Tel (34) 923 29 44 87 Fax . (34) 923 29 4574 www.usal.es

Salamanca, 29 de junio de 2015

Adjunto remito la Memoria Final correspondiente al *Proyecto de Innovación y Mejora Docente* valorado positivamente con **referencia ID2014/0051** coordinado por la **Dra. Dª. Mª Dolores González Sánchez** y desarrollado con la colaboración del siguiente **profesor**:

Dr. D. Jesús Aldegunde Carrión

En consecuencia, y de conformidad con lo establecido en la disposición novena de *CONVOCATORIA DE AYUDAS PROYECTOS DE INNOVACION Y MEJORA DOCENTE Curso 2014-2015* solicito sean emitidos los certificados correspondientes.

Atentamente,

Fdo.: Mª Dolores González Sánchez

CENTRO DE FORMACIÓN PERMANENTE
VICERRECTORADO DE DOCENCIA

PROYECTO DE INNOVACIÓN Y MEJORA DOCENTE

ID2014/0051

"CUADERNO DE EJERCICIOS" DE QUÍMICA FÍSICA I

Jesús Aldegunde Carrión

Mª Dolores González Sánchez

Departamento de Química Física

Universidad de Salamanca

Junio 2015

1 Objetivos

La asignatura *Química Física I*, de segundo curso del Grado en Química, presenta una serie de particularidades que la hacen especialmente ardua para los alumnos, ya que se trata de su primer contacto con una materia como la Física Cuántica. Por un lado, se aborda una gran cantidad de nuevas ideas alejadas de lo que hasta ahora ha sido su formación, y por otro, se hace uso de un formalismo cuya comprensión requiere tiempo, paciencia y esfuerzo. La situación se complica, además, por la deficiente base en matemáticas y física que arrastran muchos de ellos.

Este ha sido el cuarto curso en el que se ha impartido esta asignatura, y hasta este momento hemos ido variando, modificando y mejorando cada año los materiales de las clases en *Grupos Reducidos* (seminarios, clases de problemas). Esto nos ha permitido llegar a un punto de convergencia, en el que nos planteamos la posibilidad de elaborar un “Cuaderno de ejercicios” más o menos definitivo, con el que esperamos mejorar al aprovechamiento de las clases. La propuesta buscaba que los alumnos dispongan de un material de referencia con problemas y ejercicios seleccionados, acordes con el temario de la asignatura, tanto en contenido como en forma, con especial atención a la notación empleada.

2 Descripción de las actividades propuestas

Como se indicó anteriormente, el proyecto se centraba en la elaboración de un “Cuaderno de ejercicios” para la asignatura *Química Física I*, perteneciente al segundo curso del Grado en Química. Básicamente consistía en seleccionar los ejercicios y problemas, de modo coherente con los contenidos teóricos, incluyendo la resolución de los más relevantes, y las soluciones de los que no se presentaran resueltos. Con todo este material, se elaboraría el “Cuaderno de ejercicios” que se facilitará a los alumnos.

3 Resultados

Por un lado, hemos hecho uso de todos los recursos disponibles en la web. Se encuentran fácilmente colecciones de problemas y ejercicios que se proponen desde diferentes Universidades para asignaturas similares a la nuestra. Y por otro, teníamos en estos momentos todo el material elaborado por nosotros durante los cursos anteriores, del cual también se ha hecho uso.

Tareas realizadas

Una vez terminado el primer cuatrimestre del curso 2014-15, comenzamos a trabajar en los seminarios y el "Cuaderno de ejercicios" de la asignatura *Química Física I* del Grado en Química, del siguiente modo:

1. *Evaluación* de la docencia impartida en los seminarios en este curso 2014-15. Revisión de las anteriores. Se ha llevado a cabo un *feedback* que nos ha permitido corregir errores de base, y mejorar los aspectos en los que se han detectado deficiencias.

2. *Selección de ejercicios y problemas* a incluir en el "Cuaderno de ejercicios". Coherente con la evaluación anterior. En algunos casos ha sido necesario buscar recursos nuevos. En principio se preveían unas 15 clases de seminarios, agrupados en 11 temas. Se añade también el apartado de "Soluciones", y también uno de "Tablas de interés".

3. *Resolución de ejercicios relevantes:* Se han adaptado los materiales a los sistemas de unidades que se emplean en las clases, y a los conocimientos del programa que los alumnos tienen.

4. *Elaboración del "Cuaderno de ejercicios".* Incluyendo esos ejercicios resuleltos, y las soluciones del resto.

En el Anexo I se adjunta una selección de la versión actual del "Cuaderno de ejercicios", para su consulta.

4 Conclusiones

Este "Cuaderno de ejercicios" es una primera versión de un recurso docente que será fundamental en la asignatura de "Química Física I". En el Anexo I se adjunta la versión actual del "Cuaderno de ejercicios", para su consulta. La idea es seguir trabajando con este material en cursos venideros, revisando, corrigiendo, ampliando, etc. lo que sea conveniente para mejorar el Cuaderno.

Anexo I

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA

GRADO EN QUÍMICA

CUADERNO DE EJERCICIOS

QUIMICA FISICA I

UNIVERSIDAD DE SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

Jesús Aldegunde
Susana Gómez
Lola González

Índice general

Hoja 1

Herramientas matemáticas

1.1. Demuestra que
$$\frac{a+\mathrm{i}b}{c+\mathrm{i}d}=\frac{ac+bd+\mathrm{i}(bc-ad)}{c^2+d^2}$$

1.2. Expresa los siguientes números complejos en la forma exponencial:

a) $5+6\mathrm{i}$
b) $\frac{5+\mathrm{i}}{3-4\mathrm{i}}$
c) $2\mathrm{i}$
d) $\frac{2-\mathrm{i}}{1+\mathrm{i}}$
e) 4

1.3. Expresa los siguientes números complejos en la forma $a+\mathrm{i}b$:

a) $2e^{3\mathrm{i}\pi/2}$
b) $e^{\mathrm{i}\pi}$
c) $4\sqrt{3}e^{\mathrm{i}\pi/4}$
d) $\frac{\sqrt{5}}{1+\sqrt{2}}e^{\mathrm{i}\pi/4}$

1.4. Desarrolla en serie de potencias las siguientes funciones a partir del punto $(x=0)$:

- $f(x)=(1+x)^4$
- $f(x)=\frac{1}{1+x}$
- $f(x)=\mathrm{e}^{ax}$
- $f(x)=\ln(1+x)$

1.5. Calcular los valores de las siguientes cantidades:

- $\binom{5}{2}$
- $\binom{7}{4}$

1.6. Efectúa las siguientes transformaciones de coordenadas:

- Expresa el punto $x=3$, $y=1$ y $z=1$ en coordenadas esféricas.
- Expresa el punto $\rho=5$, $\theta=\frac{\pi}{4}$ y $\phi=\frac{3\pi}{4}$ en coordenadas cartesianas.

1.7. Suma las series:

- $\sum_{k=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-kx}$

Hoja 2

Mecánica Cuántica: Introducción

2.1. Determina si alguna de las siguientes funciones NO satisface la ecuación diferencial

$$y''(x) + k^2 y(x) = 0$$

- $\sin(kx)$
- $\cos(kx)$
- e^{ikx}
- e^{-ikx}
- $\sin(kx+\alpha)$, con $\alpha = cte.$

2.2. Las funciones $\cos\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$ con $n = 1, 2, 3, ...$ son ortogonales porque $\int_{-d}^{d} \cos\left(\frac{n\pi x}{d}\right)\cos\left(\frac{m\pi x}{d}\right) \mathrm{d}x = 0$ si $n \neq m$. Obtén la constante por la que habría que multiplicar las funciones para que fueran ortonormales.

2.3. Determina si estas funciones son funciones propias del operador correspondiente, obteniendo el valor propio en tal caso.

- Función x^2 del operador $\frac{x^2}{8}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$
- Función $x^3 + y^3$ del operador $x^3\frac{\partial^3}{\partial x^3} + y^3\frac{\partial^3}{\partial y^3}$
- Función $\sin 2\theta \cos\phi$ del operador $\frac{\partial^4}{\partial \theta^4}$

2.4. El operador $e^{\hat{\Omega}}$ se define como:

$$e^{\hat{\Omega}} = 1 + \hat{\Omega} + \frac{1}{2!}\hat{\Omega}^2 + \frac{1}{3!}\hat{\Omega}^3 + ... = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\hat{\Omega}^k$$

Si la función Ψ es función propia de $\hat{\Omega}$ asociada al valor propio ω, demostrar que también es función propia de $e^{\hat{\Omega}}$. ¿Cuál es el valor propio asociado?

2.5. ¿Cuáles de las funciones $\sin 3x$, $6\cos 4x$, $5x^3$, $1/x$, $3\,e^{-5x}$, $\ln 2x$ son funciones propias de los operadores d/dx y d^2/dx^2? Halla el valor propio correspondiente.

2.6. Dado el operador $\hat{\Omega} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$ $(-\infty \leq x \leq \infty)$,

a) demuestra que la función $Nxe^{-x^2/2}$ es función propia de ese operador y halla el valor propio correspondiente,

b) normaliza la función del apartado anterior calculando el valor de N,

c) calcula el valor esperado $< x >$ en el estado descrito por la misma función.

Hoja 3

Postulados de la Mecánica Cuántica

3.1. Dadas las funciones:

$\Psi_1 = \mathrm{e}^{-x}$	definida sobre el dominio x tal que	$0 < x < \infty$
$\Psi_2 = \mathrm{e}^{-x}$	definida sobre el dominio x tal que	$-\infty < x < \infty$
$\Psi_3 = \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} x}$	definida sobre el dominio x tal que	$-100 < x < 100$
$\Psi_4 = \frac{1}{x}$	definida sobre el dominio x tal que	$1 < x < \infty$
$\Psi_5 = \sin(\pi x/a)$	definida sobre el dominio x tal que	$0 \leq x \leq a$

y los operadores: $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ y $\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

a) Determina si dichas funciones son funciones de onda aceptables en los intervalos dados, y normalízalas

b) ¿Conmutan estos operadores?

c) ¿La función Ψ_5 es función propia de algún operador?

d) Calcula los valores esperados de $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ y $\hat{T}_x$ para un sistema cuya función de onda sea Ψ_5.

e) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar dicho sistema entre las distancias $\frac{3}{4}a \leq x \leq a$?

3.2. Considera un sistema cuyo estado se describe en términos de tres vectores o funciones ortonormales $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, $|\phi_3\rangle$ como:

$$|\phi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{3}|\phi_1\rangle + \frac{2}{3}|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}|\phi_3\rangle$$

Verifica que $|\phi\rangle$ está normalizada y

- Calcula la probabilidad de encontrar el sistema en cualquiera de los estados $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, $|\phi_3\rangle$. Verifica que la probabilidad total es igual a 1.
- Considera un conjunto de 810 sistemas idénticos, cada uno de ellos en el estado $|\phi\rangle$. Si se lleva a cabo medidas en todos ellos, ¿cuántos sistemas se encontrarán en cada uno de los estados $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ y $|\phi_3\rangle$?

3.3. Considera un sistema cuyo estado está dado en términos de un conjunto completo y ortonormal de cinco vectores $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, $|\phi_3\rangle$, $|\phi_4\rangle$, $|\phi_5\rangle$ como sigue:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{19}}|\phi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{19}}|\phi_2\rangle + \sqrt{\frac{2}{19}}|\phi_3\rangle + \sqrt{\frac{3}{19}}|\phi_4\rangle + \sqrt{\frac{5}{19}}|\phi_5\rangle$$

donde $|\phi_n\rangle$ son autoestados del Hamiltoniano del sistema, $\hat{H}|\phi_n\rangle = n\varepsilon_0|\phi_n\rangle$ con $n = 1, 2, 3, 4, 5$, y donde ε_0 tiene dimensiones de energía.

- Si la energía se mide en un número muy grande de sistemas idénticos que se encuentran todos inicialmente en el mismo estado $|\phi\rangle$, ¿qué valores se obtendrían y con qué probabilidades?

12

Soluciones

1.1 q.d.e.

1.2 a) $\sqrt{61}e^{0.876\mathrm{i}}$
   b) $\frac{\sqrt{26}}{5}e^{1.125\mathrm{i}}$
   c) $2e^{\frac{\pi}{2}\mathrm{i}}$
   d) $\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{2}}e^{-\mathrm{i}1.249}$

1.3 a) $-2\mathrm{i}$
   b) -1
   c) $2\sqrt{6}(1+\mathrm{i})$
   d) $\frac{\sqrt{5/2}}{1+\sqrt{2}}(1+\mathrm{i})$

1.4 a) $1+4x+6x^2+4x^3+x^4$
   b) $\sum\limits_{i=0}^{\infty}(-1)^n x^n$
   c) $\sum\limits_{n=0}^{\infty}\frac{a^n x^n}{n!}$
   d) $\sum\limits_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{x^n}{n!}$

1.5 a) 10
   b) 35

1.6 a) $(\rho=\sqrt{11}, \theta=1.23, \phi=\pi/4))$
   b) $(x=-5/2, y=5/2, z=5\sqrt{2}/2)$

1.7
- $\sum_{k=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-kx}=\frac{e^x}{e^x-1}$
- $\sum_{k=1}^{\infty}k\mathrm{e}^{-kx}=\frac{e^x}{(e^x-1)^2}$

1.8
- $\int_0^{2\pi}\sin{(ax)}dx=\frac{2\sin^2(\pi a)}{a}$
- $\int_{-\infty}^{+\infty}(3x^2+1)\mathrm{e}^{-\frac{3}{2}x^2}dx=2\sqrt{\frac{2\pi}{3}}$
- $\int_0^{\infty}\frac{3z^3}{\mathrm{e}^{2z}-1}dz=\frac{\pi^4}{80}$

1.9 Solamente la primera.

1.10 Usando la regla de la cadena: $\frac{df(g(x))}{dx}=\frac{df}{dg}\frac{dg}{dx}$

2.1 Todas cumplen la ecuación diferencial

2.2 Hay que redefinir las funciones como $\frac{1}{\sqrt{d}}\cos(\frac{n\pi x}{d})$

2.3
- x^2 si es función propia de $\frac{x^2}{8}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ con autovalor $\frac{1}{4}$.
- $x^3 + y^3$ si es función propia de $x^3\frac{\partial^3}{\partial x^3} + y^3\frac{\partial^3}{\partial y^3}$ con autovalor 6.
- $\sin 2\theta \cos\phi$ si es función propia de $\frac{\partial^4}{\partial\theta^4}$ con autovalor 16.

2.4 El autovalor es e^{ω} (para demostrarlo usa la serie de Taylor correspondiente a la exponencial).

2.5
- Sólamente $3\,e^{-5x}$ es función propia de d/dx. Su autovalor es -5.
- $\sin 3x$, $6\cos 4x$ y $3\,e^{-5x}$ son funciones propias de d^2/dx^2. Sus autovalores son -9, -16 y 25 respectivamente.

2.6
- a) El autovalor es -3.
- b) $N = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}}$
- c) $\langle x\rangle = 0$

2.7 No es función propia.

2.8 Aplicando la definición de función propia, se demuestra fácilmente que e^{-ax^2} sólo es función propia de $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2x^2$ si $a = 1/\sqrt{2}$. En tal caso, el autovalor sería $-\sqrt{2}$.

2.9 Los operadores x y d/dx no conmutan, con lo que el orden en el que se aplican condiciona el resultado final. No será lo mismo, por lo tanto, aplicar primero uno u otro.

2.10
- $\hat{M}(c_1f_1 + c_2f_2) = c_1\hat{M}f_1 + c_2\hat{M}f_2 = c_1bf_1 + c_2bf_2 = b(c_1f_1 + c_2f_2)$, donde hemos usado el caracter lineal del operador $\hat{M}$.
-
$$\begin{aligned}
\langle g_1|g_2\rangle &= \int f_1^*(f_2 + kf_1)d\tau \\
&= \int f_1^* f_2 d\tau + k\int f_1^* f_1 d\tau \\
&= \int f_1^* f_2 d\tau - \frac{\int f_1^* f_2 d\tau}{\int f_1^* f_1 d\tau}\int f_1^* f_1 d\tau \\
&= 0
\end{aligned}$$

4.1
- a) $E_n = 6.0247 \times 10^{-8}\, n^2 J = 867.56\, n^2\, kcal/mol \quad n = 1, 2, 3, 4, \ldots$
- b) $\nu = 9.09 \times 10^{15}\, Hz \qquad \Delta E = 2602.68\, kcal/mol$
- c) La razón es que la anchura de la caja es mucho mayor que el tamaño de una molécula, con lo que el espaciado entre niveles disminuye.

4.2
- La densidad de probabilidad de encontrar a una partícula en el nivel $n = 2$ es máxima en $x = a/4$ y $x = 3a/4$.
- $$\begin{aligned} n = 1 \qquad & x = a/4 \rightarrow \text{Densidad de probabilidad} = 1/a \\ & x = a/2 \rightarrow \text{Densidad de probabilidad} = 2/a \\ & x = 3a/4 \rightarrow \text{Densidad de probabilidad} = 1/a \end{aligned}$$
  $$\begin{aligned} n = 2 \qquad & x = a/4 \rightarrow \text{Densidad de probabilidad} = 2/a \\ & x = a/2 \rightarrow \text{Densidad de probabilidad} = 0 \\ & x = 3a/4 \rightarrow \text{Densidad de probabilidad} = 2/a \end{aligned}$$
- $$\begin{aligned} P([0, a/4]) &= \frac{\pi - 2}{4\pi} \\ P([a/4, a/2]) &= \frac{2 + \pi}{4\pi} \end{aligned}$$

4.3
$$P_n = \frac{1}{3} + \frac{1}{2n\pi}\left(\sin(\frac{2n\pi}{3}) - \sin(\frac{4n\pi}{3})\right)$$

$$\lim_{n\to\infty} P_n = \frac{1}{3} \quad \text{(límite clásico)}$$

4.4
- Degeneración de $E = 12\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \rightarrow 1$
- Degeneración de $E = 14\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \rightarrow 6$
- Degeneración de $E = 27\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \rightarrow 4$

4.5 Existen 13 estados y 8 niveles.

4.6
- a)
  $$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \\ \phi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{\pi x}{L}) \\ \hat{H}\phi_1(x) &= \underbrace{\frac{h^2}{2mL^2}}_{E_1}\phi_1(x) \end{aligned}$$
- b) No es función propia de ninguno de los dos operadores.
  $$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= L/2 \\ \langle \hat{p}_x \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Apéndice A

Tablas de interés

Valores de algunas constantes físicas universales. **CODATA-2010**

Velocidad de la luz en el vacío	c	2,997 924 58	10^{8}	m s^{-1}
Permeabilidad del vacío	μ_0	4π	10^{-7}	N A^{-2} (H m^{-1})
Permitividad del vacío $\left(\frac{1}{\mu_0\, c^2}\right)$	ε_0	8,854 187 817...	10^{-12}	F m^{-1} (J^{-1} C^{2} m^{-1})
Constante de Planck	h	6,626 069 57(29)	10^{-34}	J s
	$\hbar$	1,054 571 726(47)	10^{-34}	J s
Cte. de Avogadro	N_A, L	6,022 141 29(27)	10^{23}	mol^{-1}
Cte. de Boltzmann	k, k_B	1,380 6488(13)	10^{-23}	J K^{-1}
Cte. de los gases $(k_B\ N_A)$	R	8,314 4621(75)		J K^{-1} mol^{-1}
Cte. de Faraday $(e\ N_A)$	F	9,648 533 65(21)	10^{4}	C mol^{-1}

Carga elemental	e	1,602 176 565(35)	10^{-19}	C (A s)
Masa del electrón en reposo	m_e	9,109 382 91(40)	10^{-31}	kg
Masa del protón en reposo	m_p	1,672 621 777(74)	10^{-27}	kg
Factor g del electrón libre	g_e	2,002 319 304 361 53(53)		
Factor g del protón libre	g_p	5,585 694 713(46)		
Magnetón de Bohr $\left(\frac{e\hbar}{2m_e}\right)$	μ_B	9,274 009 68(20)	10^{-24}	J T^{-1} (A m^{2})
Magnetón nuclear $\left(\frac{e\hbar}{2m_p}\right)$	μ_N	5,050 783 53(11)	10^{-27}	J T^{-1} (A m^{2})
Radio de Bohr $\left(\frac{(4\pi\varepsilon_0)\,\hbar^2}{m_e\ e^2}\right)$	a_0	5,291 772 1092(17)	10^{-11}	m
Energia de Hartree $\left(\frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)\,a_0}\right)$	E_h	4,359 744 34(19)	10^{-18}	J
		27,211 383 86(68)		eV
Constante de Rydberg	R_∞	1,097 373 156 8539(55)	10^{7}	m^{-1}
	$c\,R_\infty$	3,289 841 960 364(17)	10^{15}	s^{-1} (Hz)
	$h\,c\,R_\infty$	13,605 692 53(30)		eV
	$h\,c\,R_\infty$	2,179 872 171(96)	10^{-18}	J
Cte. estructura fina $\left(\frac{(4\pi\varepsilon_0)\,\hbar\,c}{e^2}\right)$	α	7,297 352 5698(24)	10^{-3}	
	α^{-1}	137.035 999 074(44)		

Forma real de los orbitales atómicos hidrogenoides

	n	l	m_l	
$1s$	1	0	0	$\left(\frac{Z^3}{\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{Z\,r}{a_0}}$
$2s$	2	0	0	$\left(\frac{Z^3}{32\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(2-\frac{Z\,r}{a_0}\right) \cdot e^{-\frac{Z\,r}{2\,a_0}}$
$2p_x$	2	1	±1	$\left(\frac{Z^3}{32\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \frac{Z\,r}{a_0} \cdot e^{-\frac{Z\,r}{2\,a_0}} \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$
$2p_y$	2	1	±1	$\left(\frac{Z^3}{32\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \frac{Z\,r}{a_0} \cdot e^{-\frac{Z\,r}{2\,a_0}} \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$
$2p_z$	2	1	0	$\left(\frac{Z^3}{32\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \frac{Z\,r}{a_0} \cdot e^{-\frac{Z\,r}{2\,a_0}} \cdot \cos\theta$
$3s$	3	0	0	$\left(\frac{Z^3}{19683\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(27-18\,\frac{Z\,r}{a_0}+2\left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2\right) \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}}$
$3p_x$	3	1	±1	$\left(\frac{2\,Z^3}{6561\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(6\,\frac{Z\,r}{a_0}-\left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2\right) \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$
$3p_y$	3	1	±1	$\left(\frac{2\,Z^3}{6561\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(6\,\frac{Z\,r}{a_0}-\left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2\right) \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$
$3p_z$	3	1	0	$\left(\frac{2\,Z^3}{6561\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(6\,\frac{Z\,r}{a_0}-\left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2\right) \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \cos\theta$
$3d_{x^2-y^2}$	3	2	±2	$\left(\frac{Z^3}{13122\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \sin^2\theta \cdot \left(\cos^2\phi-\sin^2\phi\right)$
$3d_{xy}$	3	3	±2	$\left(\frac{2\,Z^3}{6561\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \sin^2\theta \cdot \cos\phi\,\sin\phi$
$3d_{xz}$	3	2	±1	$\left(\frac{2\,Z^3}{6561\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \cos\theta\,\sin\theta \cdot \cos\phi$
$3d_{yz}$	3	2	±1	$\left(\frac{2\,Z^3}{6561\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \cos\theta\,\sin\theta \cdot \sin\phi$
$3d_{z^2}$	3	2	0	$\left(\frac{Z^3}{39366\,\pi\,a_0^3}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{Z\,r}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Z\,r}{3\,a_0}} \cdot \left(3\cos^2\theta-1\right)$
$\ldots$				$\ldots$