

# Examen de química quàntica      Febrer-2000

Nom i Cognoms:

## TEORIA      (30%)

1. Un fotó de longitud d'ona  $\lambda=250$  nm és absorbit per una molècula en repòs que presenta una massa de  $10^{-24}$  Kg. Calculeu la velocitat de la molècula després de l'absorció del fotó.
2. Amb quina coordenada (x,y o z) és compatible  $\hat{L}_z$ ?
3. Si l'espín de l'electró fora  $3/2$ , quants electrons de valència presentaria l'àtom de Liti?
4. Considereu la funció aproximada  $\Psi(x) = Nx(L - x)$  per a descriure l'estat fonamental de la partícula confinada a una caixa monodimensional de longitud  $L$ . Calculeu N.
5. Imagineu que heu calculat  $\alpha = \langle \Psi_{3d_0} | r^2 | \Psi_{3d_0} \rangle$  i  $\beta = \langle \Psi_{3d_2} | r^2 | \Psi_{3d_2} \rangle$ . Qui creus que serà major  $\alpha$  o  $\beta$ ? Perquè?
6. Sabem que  $\Psi_{2p_0} = Ae^{-r/2a_0} \cos \theta$ . Determineu A.

# Examen de química quàntica      Febrer-2000

Nom i Cognoms:

## PROBLEMES      (70%)

Fer-ne quatre

1. Fent ús de la funció  $\Psi(x) = e^{-ax^2}$  obtenir una aproximació al valor de l'energia de l'estat fonamental de l'oscil·lador quàrtic descrit per l'hamiltonià:  
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^4.$$
2. Calculeu  $\langle \Psi_0 | \hat{L}_z | \Psi_0 \rangle$  a una caixa quadrada bidimensional. Ajuda: treballa en coordenades cartesianes.
3. Determineu els termes espectroscòpics associats a les configuracions  $3p4p^2$  i  $3p4p^4$ . Calculeu el nombre total de microestats. Calculeu el nombre de microestats de cada terme. (Es recomana que comproveu que la suma de microestats dels termes coincideix amb el nombre total de microestats associats a la configuració electrònica).
4.
  - Amb 3 electrons podem obtenir dos acoblaments (doblet) d'espín  $\frac{1}{2}$ , descrits per les funcions  $\phi_1 = 2\alpha\alpha\beta - \alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha$  i  $\phi_2 = \alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha$ . Normalitzeu aquestes funcions.
  - L'orbital molecular  $\phi = \frac{1}{2}\psi_1 + \frac{3}{4}\psi_2$  esta normalitzar com també ho estan els orbitals atòmics  $\psi_1$  i  $\psi_2$ . Calculeu el solapament  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ .
5. Considereu l'estructura  $\pi$ -electrònica de la molècula  $C(CH_2)_3$ . Calculeu:
  - a) els 4 orbitals moleculars  $\pi$ :  $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ , i les seves corresponents energies orbitals (en unitats  $\alpha$  i  $\beta$ )  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$ .
  - b) Les energies de les configuracions  $|\phi_1^2\phi_2\phi_3\rangle, |\phi_1\phi_2^2\phi_3\rangle$  i  $|\phi_1\phi_2\phi_3\phi_4\rangle$ .
  - c) Per a la configuració fonamental, calculeu l'energia de ressonància (també en unitats  $\beta$ ).