Examen de química quàntica Febrer 1999.

NOM i COGNOMS

1. Les primeres línies de la sèrie de Balmer de l'espectre de l'hidrogen són 656.46, 486.27, 434.17, 410.29 nm. Trobeu l'energia d'ionització de l'hidrogen.
   Ajuda: La sèrie de Balmer és la segona (és a dir, transicions des d'$n = 2$).
   Dades: h= 6.62610^{-34} J s; c= $2.998\,10^{8}$ m/s; 1 nm = 10^{-9}m.

2. L'operador $e^{\hat{A}}$ té significat d'expansió en sèrie Taylor: $e^{\hat{A}} = \sum_n \frac{1}{n!}\hat{A}^n$. Mostreu que si succeeix: $\hat{A}|a >= \lambda_a|a >$, aleshores $|a >$ és també autofunció de l'operador $e^{\hat{A}}$. Determineu-ne l'autovalor.

3. ¿Quina és la màxima precisió en la que podem determinar el moment lineal d'un electró confinat a una caixa monodimensional de longitud $L = 10^{-10}$ m ?
   Ajuda: Principi de Heisemberg: $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$, amb $\Delta z = \sqrt{< z^2 > - < z >^2}$. Estimeu la precisió com el doble de la desviació quadràtica.
   Dades: h= $6.626\,10^{-34}$ J s.

4. Imagineu la funció $f(x) = 2\cos x + 4$. Aquesta funció pot expandir-se en la base complerta infinito-dimensional dels polinomis: $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$. Calculeu c_0, c_1 i c_2.

5. El punt de retorn d'un sistema és aquella vàlua de la coordenada per a la qual l'energia cinètica és zero i, aleshores, l'energia total és igual a l'energia potencial. Clàssicament no es pot traspassar aquest punt (e.g. una pedra llançada cap amunt amb una energia E no pot anar mes enllà d'una alçada h tal que $E = mgh$). Però quànticament si que es pot. (a) Calculeu l'expressió del punt clàssic de retorn per a un oscil·lador harmònic a un estat Φ_n. (b) Calculeu la probabilitat de trobar l'oscil·lador més enllà del punt de retorn ξ_{TP} quan aquest l'oscil·lador es troba a l'estat fonamental $\Phi_0 = \pi^{-1/4}e^{-\xi^2/2}$.
   Dades: Es defineix la funció error $Erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-x^2}dx$. A la taula següent hi ha alguns valors d'aquesta funció que podeu utilitzar. Podeu aproximar altres valors mitjançant interpolació lineal.

x	0	1/2	1	3/2	2
Erf	0	0.5205	0.8427	0.9661	0.9953

6. Calculeu el valor mitjà de l'operador $\widehat{L_z}$, $< \widehat{L_z} >$, per al cas de la partícula a l'anell quan es troba a un estat definit per la funció normalitzada $\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 3\phi$.

7. Normalment pensem en una caixa monodimensional horitzontal. Imagineu-la vertical. Aleshores apareix l'energia potencial gravitatòria $V = mgh$, on $g = 9.8$ m/s^2. Considereu una caixa de longitud $L = 10$Å$= 10^{-9}$m. ¿Seria correcte fer ús de la teoria de pertorbacions per a calcular (amb fiabilitat) els nivells d'energia d'un electró a l'esmentada caixa vertical? Raoneu la resposta.
Ajuda: $\Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$; $E_n^{(0)} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$; $E_n^{(1)} = < \Psi_n^{(0)} | \hat{V} | \Psi_n^{(0)} >$
Dades: h$= 6.626\,10^{-34}$ J s; m$_e = 9.109\,10^{-31}$ Kg.

8. Es proposa la funció $\Psi = N \begin{bmatrix} 1s(1)\beta(1) & 1s(2)\beta(2) & 1s(3)\beta(3) \\ 2s(1)\beta(1) & 2s(2)\beta(2) & 2s(3)\beta(3) \\ 3s(1)\beta(1) & 3s(2)\beta(2) & 3s(3)\beta(3) \end{bmatrix}$ com a funció d'ona corresponent a un estat excitat de l'àtom de Liti. A la fòrmula, $ns(i)\beta(i)$ representa l'espín-orbital ocupat per l'electró "i". Aquest espín-orbital és producte de l'orbital ns (autofunció de l'hamiltoniana del Li^{+2}) i la funció d'espín $m_s = -1/2$. (a) ¿Compleix aquesta funció el principi de Pauli? (b) Quins són els seus moments angulars L^2, L_z, S^2 i S_z?

9. Calculeu els termes i nivells corresponents a les configuracions electròniques $1s2p$, $2p3p$ i $3d^2$.

10. Calculeu les energies (en funció d'α i β) dels següents tres MO's (Huckel) no normalitzats,

Ψ	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
Ψ_a	1	2	2	1	1	1
Ψ_b	-1	0	0	-1	1	1
Ψ_c	1	1	-1	-1	1	-1

corresponents a la molècula: $\begin{array}{cccc} 5 & & & 4 \\ & 2 & 3 & \\ 1 & & & 6 \end{array}$