

Nom i Cognoms

Feu 5 de les 6 preguntes.

1. Demostreu que

- (a) $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, x] \rangle$.
- (b) $[\hat{\mathcal{H}}, x] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}$ amb la qual cosa: $m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle \hat{p} \rangle$.

2. Un sistema està descrit per la funció $\Psi = Ne^{-ax^4}$ i té energia $E = 0$. Quina és la forma del potencial $V(x)$?

3. • (a) Per a una partícula a un anell $\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos 3\phi$. Escriviu l'hamiltonià, evalueu $\hat{\mathcal{H}}\Psi$, identifiqueu energia i número quàntic. És el moment angular una constant de moviment? Justifiqueu la resposta. Nota: $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$.

• (b) Demostreu que si $|LM\rangle$ és pròpia de \hat{L}_z , aleshores $\langle LM | \hat{L}_x | LM \rangle = \langle LM | \hat{L}_y | LM \rangle = 0$. Exemplifiqueu-ho en el cas de la funció $|LM\rangle = x + iy$.

4. Clàssicament una partícula no pot sobrepassar aquell punt on l'energia total iguala l'energia potencial (punt de retorn). Per a l'hidrogen, $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} e^{-r/a}$, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$, $E_{1s} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$. Calculeu el punt (radi) de retorn $r_{\infty}^{(1s)}$ i la probabilitat que $r^{(1s)} > r_{\infty}^{(1s)}$.

5. Proposem la funció

$$\Psi = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{L}} \cos \frac{\pi x}{2L} & \text{si } |x| \leq L \\ 0 & \text{si } |x| > L \end{cases} \quad (1)$$

per a descriure l'estat fonamental de l'oscillador harmònic. Amb el resultat que: $\langle \Psi | (-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2) | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} + kL^2 \frac{4\pi^2 - 24}{24\pi^2}$, es demana l'energia que proporciona el mètode variacional si L és el paràmetre a optimitzar. Compareu el resultat amb l'energia exacta $\frac{1}{2} \hbar \omega$.

6. El tractament MO-LCAO d'una molcula A-B-C-D dona lloc a:

$$\Psi_1 = \begin{bmatrix} a_1 \\ -b_1 \\ -c_1 \\ d_1 \end{bmatrix}; \Psi_2 = \begin{bmatrix} a_2 \\ -b_2 \\ c_2 \\ -d_2 \end{bmatrix}; \Psi_3 = \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \\ d_3 \end{bmatrix}; \Psi_4 = \begin{bmatrix} a_4 \\ b_4 \\ -c_4 \\ -d_4 \end{bmatrix}$$

on $a_i, b_i, c_i, d_i > 0$. Ordeneu els MOs de major a menor energia.

La substitució electrofílica de $H_2C = C_3H_2$ presenta dos possibles productes A i B (A representa $HEC = C_3H_2$ mentre que B representa $H_2C = C_3HE$). Amb ajut del mètode Huckel indiqueu quin és el producte majoritari (A o B) de la reacció $C_4H_4 + E \rightarrow C_4H_3E$.