

# Examen de química quàntica 12-09-1997

Nom i Cognoms:

Teoria (40%).

Indicar i justificar breument quines d'entre les següents afirmacions són veritat i quines són falses. (Cas que una afirmació siga falsa, la millor justificació és un contraexemple).

1. La funció d'estat és sempre una funció pròpia de l'hamiltonià.
2. Qualsevol combinació lineal de funcions pròpies de l'hamiltonià és una funció pròpia de l'hamiltonià.
3. Si la funció d'estat no és pròpia de l'operador  $\hat{A}$ , aleshores, una mesura de la propietat  $A$  podria donar lloc a un resultat que no seria una de les vàlues pròpies d' $\hat{A}$ .
4. Si dos operadors no commuten, no poden tenir cap funció pròpia comuna.
5. La funció d'estat de sistemes estacionaris no conté la variable temps.
6.  $\Phi$  és zero en la posició del nucli per a tots els estats estacionaris de l'àtom d'hidrogen.
7. A l'àtom d'hidrogen el valor permés mes baix del número quàntic  $n$  és zero.
8. La probabilitat de trobar a l'electró en la posició del nucli és zero per a tots els estats estacionaris de l'àtom d'hidrogen.
9. Els orbitals descrits per la terna ( $n = 2$ ;  $l = 1$ ;  $m = 0, \pm 1$ ) s'anomenen orbitals 2p, i la seva "forma" es correspon amb dues esferes tangents alineades al llarg del eixos x,y,z segons el cas.
10. La funció de qualsevol conjunt de fermions és un determinat d'Slater.

Problemes (60%).

1. Apliqueu les regles de quantificació de Sommerfeld-Wilson a un oscil·lador harmònic simple (una partícula de massa  $m$  sotmesa a una força  $F = -kx$ ). Deduiu l'equació per a les energies permeses d'aquest oscil·lador harmònic. (Ajuda:  $\int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx = \frac{\pi}{4} a^2$ ).
2. Si  $\Psi = e^{-\frac{x^2}{2}}$  és cert autoestat d'un sistema amb energia  $1/2$  u.e. ( $\hbar = m = 1$ ),
  - Trobeu el potencial  $V(x)$  a que està sotmés el sistema.
  - Pot presentar aquest sistema algun estat estacionari de menor energia que l'estat  $\Psi$  esmentat abans?. Justifica la resposta.
3. Demostreu que  $\alpha$  i  $\beta$  són funcions pròpies de  $\hat{S}_x^2$  però no ho són de  $\hat{S}_x$ . ( $\hat{J}_{\pm} \Xi(J, M) = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \Xi(J, M \pm 1)$ ).
4. a) Calculeu els termes de la configuració  $1s^2 2s^2 2p^6 3p^5 g$ .  
b) Quants estats pertanyen al terme definit per  $L = 2$  i  $S = 1$ ?  
c) Quants estats pertanyen a les configuracions  $1s^2 2s^2 2p^2$  i  $1s^2 2s^2 2p^3 p$  del Carboni?
5. La funció  $\Phi_{211}$  de l'àtom d'hidrogen és:

$$\Phi_{211} = \frac{1}{8\pi a_0^4} r \sin \theta e^{i\phi} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

on  $a_0$  és el radi de Bohr. Calculeu el valor  $r_0$  que fa màxima la distribució de probabilitat radial.

6. Apliqueu el mètode de Hückel al radical al·lil,  $CH_2CHCH_2$ . Trobeu els MOs. Les energies orbitals. L'energia de l'estat fonamental. L'energia de ressonància de l'estat fonamental. La freqüència de la radiació que provocaria la transició des de l'estat fonamental al primer estat excitat.