Examen de Química Física III (test de los temas 1, 2 y 3) 9 de abril de 2003

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nombre y apellidos: . . . . **Grupo:**

El alumno que se retire del examen debe entregar este impreso al profesor.

Hay una sola respuesta válida para cada cuestión.

Las respuestas incorrectas descuentan 1/4 de la puntuación de la cuestión (las cuestiones en blanco no descuentan). La puntuación indicada está referida a un total de 10 puntos para este test.

Las respuestas a cada cuestión deben trasladarse al siguiente casillero (*Respuestas del alumno*):

Cuestiones:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respuestas del alumno:									
Línea reservada para el profesor:									

1. (1 punto) Un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado descrito por la función de onda normalizada $\psi = (1/2)\phi_{1s} + (1/2)\phi_{2s} + (1/\sqrt{2})\phi_{2p0}$. Las probabilidades de que al medir la energía total, L^2 y L_z se obtengan los valores (en unidades atómicas) $-1/8$, 0 y 0, respectivamente, son:

A) 0,25; 0,25 y 0,5

B) 0,5; 0,5 y 0,7071

C) 0,75; 0,5 y 0,5

D) 0,75; 0,5 y 1

2. (1 punto) Indica cual de las siguientes afirmaciones relativas al método variacional es *cierta*:

A) Requiere que el hamiltoniano del sistema pueda expresarse como suma de un término cuyas funciones propias sean conocidas y otro pequeño frente al primero.

B) Proporciona valores para la energía del estado fundamental superiores o iguales al exacto.

C) No puede conducir a la energía exacta del estado fundamental.

D) Ninguna de las anteriores.

3. (1 punto) Indica cual de las siguientes afirmaciones relativas al valor esperado de un observable es *cierta*:

A) Es siempre un valor propio del operador correspondiente.

B) Es siempre la media aritmética de todos los valores propios del operador correspondiente.

C) Es siempre la media geométrica de los valores propios del operador correspondiente.

D) No puede coincidir con ningún valor propio del operador correspondiente.

E) Depende del estado del sistema.

4. (1 punto) La región clásicamente prohibida para el electrón de un ion He^+ ($Z = 2$) en su estado fundamental es, en unidades atómicas,

A) $r < 1$, $\theta \in (0,\pi)$, $\varphi \in (0,2\pi)$

B) $r > 1$, $\theta \in (0,\pi)$, $\varphi \in (0,2\pi)$

C) $r < 2$, $\theta \in (0,\pi)$, $\varphi \in (0,2\pi)$

D) $r > 2$, $\theta \in (0,\pi)$, $\varphi \in (0,2\pi)$

Examen de Química Física III (test de los temas 1, 2 y 3) 9 de abril de 2003

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

5. (1 punto) Dos funciones propias de un operador $\hat{A}$ cualquiera son degeneradas si (indica la afirmación *cierta*):

A) tienen la misma energía

B) son linealmente independientes.

C) son ortogonales entre sí.

D) son ortonormales.

E) ninguna de las anteriores.

6. (1 punto) Un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ν se encuentra, en el instante t=0, en el estado descrito por la función de onda normalizada $\Psi_{t=0}(x) = (1/\sqrt{2})\{\Phi_0(x) + \Phi_1(x)\}$, donde Φ_0 y Φ_1 son las dos funciones propias (normalizadas) de energías más bajas del hamiltoniano. ¿Qué función de onda describirá el sistema en un instante posterior t>0 si ha evolucionado librementente entre 0 y t?

A) $(1/\sqrt{2})\{\Phi_0 + \Phi_1\}$

B) $(1/\sqrt{2})e^{-i\pi\nu t}\{\Phi_0 + \Phi_1\}$

C) $(1/\sqrt{2})\{\Phi_0 + e^{-i\pi\nu t}\Phi_1\}$

D) $(1/\sqrt{2})\{e^{-i\pi\nu t}\Phi_0 + e^{-i3\pi\nu t}\Phi_1\}$

7. (1 punto) Para una átomo hidrogenoide determinado, indica el número de spinorbitales hidrogenoides independientes que tienen la misma energía que el $\phi_{5f_2}\alpha$.

A) 50

B) 25

C) 5

D) 1

8. (1 punto) Indica cual de las siguientes funciones no es propia del operador energía cinética de una partícula cuyo movimiento está restringido al eje x:

A) $e^{ikx} + e^{-ikx}$

B) $e^{ikx} + e^{i2kx}$

C) $e^{ikx} - \cos(kx)$

D) $e^{ikx} + 2\cos(kx)$

E) $\text{sen}(kx) - \cos(kx)$

9. (2 puntos) Una partícula se encuentra en el estado fundamental de una caja de potencial unidimensional de límites 0 y a. Si medimos su posición, la probabilidad de obtener un valor comprendido entre $a/4$ y $3a/4$ es:

A) 0

B) 0,3333

C) 0,5

E) 0,75

F) 0,8183

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) — 21 d'abril de 2004

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.
Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).
La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.
Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*en majúscules*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1.(1 punt) Indiqueu quina de las afirmacions següents, referents a la funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema, és falsa.
A) Ha de ser contínua.
B) Ha de ser de quadrat integrable.
C) El signe de la funció indica les zones amb càrrega elèctrica positiva o negativa del sistema.
D) És una funció real o complexa de variable(s) real(s).

2.(1 punt) Indiqueu quin dels següents parells de funcions d'ona normalitzades d'una caixa de potencial tridimensional cúbica de costat a representa dos estats estacionaris *no* degenerats respecte de l'energia total:
A) $\sqrt{8/a^3}\,\sin(2\pi x/a)\sin(5\pi y/a)\sin(5\pi z/a)$; $\sqrt{8/a^3}\,\sin(5\pi x/a)\sin(2\pi y/a)\sin(5\pi z/a)$
B) $\sqrt{8/a^3}\,\sin(2\pi x/a)\sin(5\pi y/a)\sin(5\pi z/a)$; $\sqrt{8/a^3}\,\sin(5\pi x/a)\sin(5\pi y/a)\sin(2\pi z/a)$
C) $\sqrt{8/a^3}\,\sin(2\pi x/a)\sin(5\pi y/a)\sin(5\pi z/a)$; $\sqrt{8/a^3}\,\sin(2\pi x/a)\sin(4\pi y/a)\sin(6\pi z/a)$
D) $\sqrt{8/a^3}\,\sin(2\pi x/a)\sin(5\pi y/a)\sin(5\pi z/a)$; $\sqrt{8/a^3}\,\sin(\pi x/a)\sin(2\pi y/a)\sin(7\pi z/a)$

3. (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba el l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada $\psi = (1/\sqrt{2})\phi_{1s}\alpha + (1/\sqrt{3})\phi_{1s}\beta + (1/\sqrt{6})\phi_{2p_1}\alpha$. Si mesurem el component z del moment angular de spin de l'electró, quina és la probabilitat d'obtenir el valor $\hbar/2$?
A) $1/\sqrt{2}$
B) $(1/\sqrt{2}) + (1/\sqrt{3})$
C) $(1/\sqrt{2}) + (1/\sqrt{6})$
D) 1/2
E) 2/3

4. (1 punt) D'acord amb la relació que han de complir les indeterminacions de dos observables i tenint en compte que $\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$, el producte $\Delta L_x\ \Delta L_y$ per a l'electró d'un àtom d'hidrògen en l'estat descrit per l'orbital $\phi_{3d_{+2}}$ ha de ser més gran o igual que:
A) 0
B) $\hbar/2$
C) $\hbar^2/2$
D) $\hbar$
E) $\hbar^2$

5.(1 punt) Indiqueu quina de las afirmacions següents és certa.

A) Dos operadors, $\hat{A}$ i $\hat{B}$ són iguals si i nomès si existeix una funció Ψ per a la qual es compleix: $\hat{A}\Psi = \hat{B}\Psi$.

B) Els valors propis dels operadors quàntics associats a observables poden ser reals o complexos.

C) Els operadors quàntics associats a observables són sempre aplicacions lineals.

D) L'operador producte de dos operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ compleix la igualtat: $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}\Psi\ \hat{B}\Psi$ per a qualsevol funció Ψ.

6.(1 punt) De quantes variables depenen les funcions d'ona d'un sistema format per tres partícules que es poden moure per tot l'espai, la primera de les quals té spin 1/2, la segona spin 1 i la tercera spin 3/2?

A) 6

B) 9

C) 12

D) 18

7.(1 punt) Tenint en compte que l'operador $\hat{p}_x$ és lineal i hermític, indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a l'operador $\hat{A} = \partial/\partial x$, és certa:

A) És lineal i hermític.

B) És lineal i no hermític.

C) És no lineal i hermític.

D) És no lineal i no hermític.

8.(1 punt) Si, per a una caixa de potencial unidimensional d'amplada a, emprem una funció de prova variacional del tipus

$\Psi(x) = c_1 \sin(\pi x/a) + c_2 \sin(3\pi x/a)$ per a $x \in (0,a)$

$\Psi(x) = 0$ per a $x \notin (0,a)$

i optimitzem els paràmetres variacionals c_1 i c_2, el valor que obtindrem com a aproximació a l'energia de l'estat fonamental serà:

A) $= 0$

B) $< h^2/8ma^2$

C) $= h^2/8ma^2$

D) $> h^2/8ma^2$

E) No es pot utilitzar una funció de prova variacional d'aquest tipus perquè no compleix les condicions de contorn del problema.

9.(2 punts) Calculeu, en unitats atòmiques, el valor esperat de l'energia potencial ($\langle V \rangle$) d'un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per l'orbital hidrogenoid ϕ_{2p_z}.

A) 0

B) $-1/4$

C) $-1/2$

D) $(-1/32\pi) \cos^2\theta$

E) $(-1/16\pi) \cos^2\theta$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA
Departament de Química Física

22 d'abril de 2005

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten). La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.
Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent en majúscules (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

Qüestió:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Resposta:									

1 (1 punt) L'expressió de l'operador $\hat{L}_x$ és (indiqueu l'opció correcta):

A) $-i\hbar\ \partial/\partial\varphi$

B) $-i\hbar\ \partial/\partial x$

C) $-i\hbar\ x\,\partial/\partial x$

D) $-i\hbar\ (y\,\partial/\partial z - z\,\partial/\partial y)$

2 (1 punt) L'experiment de Stern-Gerlach posa en evidència l'existència de (indiqueu l'opció correcta):
A) la càrrega de l'electró.
B) l'spin de l'electró.
C) el moment dipolar elèctric de l'electró.
D) el moviment rotacional de l'electró al voltant de si mateix.

3 (1 punt) Un oscil·lador harmònic unidimensional es troba, en l'instant t=0, en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada: $\Psi = (2/3)\Phi_0 + (2/3)\Phi_1 + (1/3)\Phi_2$, on Φ_0, Φ_1 i Φ_2 són les funcions d'ona dels estats estacionaris d'energies més baixes. El valor esperat de l'energia total del sistema en aquell estat és:
A) $(7/6)h\nu$
B) $(9/6)h\nu$
C) $(13/6)h\nu$
D) $(9/2)h\nu$

4 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en un estat amb un moment angular de mòdul al quadrat 2 unitats atòmiques i component z nul·la. En mesurar l'energia de l'àtom hi ha un 25% de probabilitat de trobar el valor –(1/8) hartrees i un 75% de probar el valor –(1/18) hartrees. Indiqueu quina de les funcions d'ona següents és compatible amb aquests resultats:

A) $(1/4)\ \phi_{2p_0} + (3/4)\ \phi_{3p_0}$

B) $(1/2)\ \phi_{2p_z} + (\sqrt{3}/2)\ \phi_{3p_z}$

C) $(1/4)\ \phi_{2p_x} + (3/4)\ \phi_{3p_x}$

D) $(1/2)\ \phi_{3p_0} + (\sqrt{3}/2)\ \phi_{3d_0}$

5 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és falsa:
A) La probabilitat de trobar un electró en un volum de l'espai pot ser menor que 1.
B) Si les funcions Φ_1 i Φ_2 estan normalitzades, la funció $\Psi = \Phi_1 + \Phi_2$ també ho està.
C) La funció d'ona que descriu un estat estacionari sempre es pot expressar com a producte d'una funció de les coordenades per una funció del temps que pren valors complexes de mòdul 1.
D) La funció d'ona que descriu un estat estacionari és sempre pròpia de l'hamiltonià del sistema.

6 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és falsa:
A) No pot existir cap estat amb indeterminacions nul·les per a la posició i el moment d'una partícula.
B) Poden haver-hi casos en que el mètode variacional condueixi a l'energia exacta de l'estat fonamental.
C) El producte escalar de dues funcions pròpies d'un operador hermític amb valors propis diferents és sempre zero.
D) La funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema determina de manera unívoca el valor que s'obtindrà en una mesura d'un observable qualsevol del sistema.

7 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents referents a l'orbital hidrogenoide $\phi_{3d_{z^2}}$ és falsa:
A) És una funció pròpia de l'operador $\hat{L}^2$ amb valor propi $6\hbar^2$.
B) Representa un estat estacionari d'un àtom monoelectrònic.
C) El pla xy n'és un pla nodal.
D) La superfície d'equació $3\cos^2\theta = 1$ n'és una superfície nodal.

8 (1,5 punts) L'energia potencial clàssica d'un oscil·lador harmònic tridimensional és
$V(x) = (1/2)k_x x^2 + (1/2)k_y y^2 + (1/2)k_z z^2$ amb $k_y = k_x$ i $k_z = 4k_x$.
Indiqueu quines són les degeneracions dels 3 primers nivells d'energia del sistema:
A) 1, 2, 4
B) 1, 3, 6
C) 1, 4, 9
D) 2, 3, 4
E) 2, 8, 18

9 (1,5 punts) Una partícula té el seu moviment restringit a l'intèrval $(0, a)$ de l'eix x i està sotmesa a l'energia potencial $V(x) = bx$, on b és una constant petita, per a $x \in (0, a)$ i $V(x) = \infty$ per a $x \notin (0, a)$. L'energia d'un estat estacionari *qualsevol* (Φ_n) del sistema, corregida fins a primer ordre del mètode pertorbacional, és:
A) ab
B) $ab/2$
C) $h^2/(8ma^2) + ab$
D) $h^2/(8ma^2) + ab/2$
E) $n^2h^2/(8ma^2) + ab$
F) $n^2h^2/(8ma^2) + ab/2$

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

21 d'abril de 2006

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

1 (1 punt) Quina de les següents respostes no és certa per a un operador hermític $\hat{A}$ i dues funcions diferents f i g qualssevol del seu domini?

A) $\left\langle \hat{A}f \middle| g \right\rangle = \left\langle f \middle| \hat{A}g \right\rangle$
B) $\left\langle g \middle| \hat{A}f \right\rangle^* = \left\langle f \middle| \hat{A}g \right\rangle$
C) $\left\langle \hat{A}g \middle| f \right\rangle^* = \left\langle f \middle| \hat{A}g \right\rangle$
D) $\left\langle \hat{A}f \middle| g \right\rangle^* = \left\langle f \middle| \hat{A}g \right\rangle$

2 (1,5 punts) Quant valdrà la incertesa en el valor de L_z per a una àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = N(\phi_{1s} + \phi_{2p_x})$?

A) 0
B) $\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar$
C) $\sqrt{\frac{2}{3}}\hbar$
D) $\frac{1}{2}\hbar$

3 (1 punt) La correcció de primer ordre per teoria de pertorbacions per a un estat qualsevol d'un oscil·lador unidimensional amb potencial $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + 0{,}01x^3$ és

A) sempre zero
B) zero o no depenent de l'estat
C) més gran que zero
D) més petit que zero

4 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents referents als valors propis d'un operador quàntic és falsa:

A) L'espectre d'un operador hermític és real.
B) Alguns operadors poden tenir un espectre amb una part discreta i una part contínua.
C) Els valors de l'espectre d'un operador sempre estan quantitzats.
D) Els valors de l'espectre d'un operador són els únics valors que es poden obtenir en mesurar l'observable corresponent.

5 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents referides a una partícula en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites és certa:

A) La probabilitat de trobar la partícula al centre de la caixa és màxima per a l'estat n=2.
B) L'energia cinètica de la partícula en l'estat n=2 és més gran quan més petita és la caixa.
C) La funció d'ona de l'estat n=5 presenta 5 nodes.
D) La partícula pot estar fora de la caixa amb una probabilitat molt petita.

6 (1,5 punts) Un oscil·lador harmònic unidimensional està en l'estat $\psi(x;t) = \frac{1}{2}\phi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}$ on $\phi_0(x)$ i $\phi_1(x)$ són funciones pròpies del seu hamiltonià. Indiqueu la resposta certa en relació al valor esperat de x per a aquest estat

A) El valor esperat és sempre nul.
B) El valor esperat és igual a $\frac{1}{4}\langle\hat{x}\rangle_{\phi_0} + \frac{3}{4}\langle\hat{x}\rangle_{\phi_1}$.
C) El valor esperat serà constant i no nul per a qualsevol valor del temps (t).
D) El valor esperat variarà amb el temps (t).

7 (1 punt) Indica quina de les afirmacions següents referides al moment angular d'spin d'una partícula és falsa:

A) L'spin no és produït per la rotació de la partícula sobre si mateixa.
B) Els operadors associats a les seves components no commuten entre si.
C) Per a una partícula determinada, el seu mòdul al quadrat pot prendre més d'un valor.
D) Les funcions d'spin α i β de l'electró són ortogonals entre si.

8 (1 punt) En un àtom d'hidrogen en l'estat $\psi = \frac{1}{2}(\phi_{2s} + \phi_{2p_{+1}} + \phi_{2p_{-1}} + \phi_{2p_0})$ fem una mesura de L^2 i trobem el valor $2\hbar^2$. Quin serà l'estat del sistema si tot seguit mesurem L_z i obtenim zero?

A) ϕ_{2s}
B) $\phi_{2p_{+1}}$
C) ϕ_{2p_0}
D) $\phi_{2p_{-1}}$

9 (1 punt) Quant valdrà el valor esperat de r per a un àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental?

A) 1
B) 3/2
C) 2
D) 0,529177

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *13 d'abril de 2007*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

1.- **(1 punt)** La degeneració del primer nivell excitat d'una partícula dins d'una caixa de potencial cúbica de costat *a* és

A) 1
B) 3
C) 4
D) 6

2.- **(1 punt)** Si dos operadors commuten,

A) existeix sempre un conjunt complet de funcions pròpies comú als dos operadors
B) totes les funcions pròpies d'un dels operadors ho són també de l'altre
C) totes les funcions pròpies d'un operador són diferents de les de l'altre
D) els dos operadors són iguals

3.- **(1 punt)** Quina de les següents afirmacions respecte a la densitat de probabilitat $\left|\psi(x,y)\right|^2$ és falsa:

A) Té les unitats de l'invers de l'element de volum corresponent (en aquest cas m^{-2})
B) És sempre un nombre real
C) És igual a $\psi(x,y)\psi^*(x,y)$
D) Pot prendre valors positius o negatius

4.- **(1 punt)** Per a l'àtom d'hidrogen s'han mesurat dues propietats, l'energia, obtenint un valor de –0,03125 hartrees amb probabilitat 1, i el component z del moment angular, obtenint un valor de 1 u.a. també amb probabilitat 1. Quants orbitals linealment independents de l'àtom d'hidrogen compliran això?

A) 1
B) 3
C) 6
D) 9

5.- **(1 punt)** Quina és l'energia (en u.a.) d'un electró que es troba en una caixa de potencial unidimensional d'amplada 1 bohr amb un potencial V(x) = 0,5 u.a. en l'estat amb n=4?

A) $8\pi^2$
B) 1/32
C) $9\pi^2$
D) $8\pi^2 + 0,5$

6.- (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és falsa:

A) La mesura d'un observable A en qualsevol estat descrit per una funció d'ona que no sigui pròpia de l'operador $\hat{A}$ donarà com a resultat $\langle \hat{A} \rangle$.
B) L'espectre d'un operador pot tenir una part discreta i una altre contínua.
C) L'operador energia cinètica d'una partícula lliure (en una dimensió) és el mateix que el d'un oscil·lador harmònic unidimensional.
D) Dues funcions d'ona que difereixen en una constant multiplicativa de la forma $e^{i\alpha}$ representen el mateix estat físic.

7.- (1 punt) Si intentem resoldre el problema d'una partícula en una caixa de potencial unidimensional d'extrems [0,a] amb V(x)=0 pel mètode variacional usant com a funció de prova la funció $\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ obtindrem una aproximació a l'energia de l'estat fonamental que serà

A) 0
B) $\frac{h^2}{8ma^2} - \frac{\pi}{2}$
C) $\frac{h^2}{8ma^2} + \frac{\pi}{2}$
D) cap, perquè aquesta funció no és adequada per ser usada en el mètode variacional

8.- (1 punt) Quina és la probabilitat d'obtenir el valor $6\hbar^2$ en mesurar el mòdul al quadrat del moment angular d'un àtom d'hidrogen si es troba en un estat descrit per la funció $\psi = N(\phi_{2s} + \phi_{2p_x} + \phi_{3d_{xy}} + \phi_{3d_{xz}})$ on N és la constant de normalització?

A) 1/2
B) 1/4
C) 1/8
D) 1/16

9.- (1 punt) En el mètode variacional lineal, les funcions que s'utilitzen per expressar la funció de prova com a combinació lineal

A) han de ser un conjunt ortonormal i complet
B) han de ser necessàriament ortogonals
C) han de ser linealment independents
D) han de ser linealment dependents

10.- (1 punt) Si l'ió Li^{2+} es troba en un estat descrit per la funció d'ona $\psi = N(\phi_{2p_x} + 2\phi_{3d_{zx}} + \phi_{4f_{xyz}})$ on N és la constant de normalització, la incertesa en l'energia en u.a. serà

A) 0,0
B) 0,0679
C) 0,2617
D) 0,7125

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

18 d'abril de 2008

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

1.- (1 punt) Una partícula es troba en una caixa de potencial bidimensional amb $x \in (0,a)$ i $y \in (0,b)$. Si aquest sistema està en el seu estat fonamental, quina és la probabilitat de trobar la partícula en la zona $x \in \left(0,\frac{a}{2}\right)$ i $y \in \left(\frac{b}{2},b\right)$?

A) 0
B) 1/4
C) 1/2
D) 3/4
E) 1

2.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents expressions és igual al commutador $\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]$:

A) $\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}$
B) $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}$
C) $\hat{C}\hat{A}\hat{B}-\hat{A}\hat{B}\hat{C}$
D) $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]$

3.- (1 punt) Un àtom d'hidrogen està en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{2px}\alpha + \phi_{2py}\beta + \phi_{2pz}\alpha\right)$. Els valors esperats corresponents als operadors $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ i $\hat{S}_z$ seran

A) $-\frac{1}{8}E_h,\ 2\hbar^2,\ 0\hbar,\ \frac{1}{6}\hbar$
B) $-\frac{1}{2}E_h,\ 2\hbar^2,\ 0\hbar,\ \frac{1}{3}\hbar$
C) $-\frac{1}{8}E_h,\ 0\hbar^2,\ 0\hbar,\ \frac{2}{3}\hbar$
D) $-\frac{1}{8}E_h,\ 2\hbar^2,\ 2\hbar,\ \frac{1}{6}\hbar$

4.- (1 punt) En un oscil·lador harmònic bidimensional de constants k_x i k_y iguals, la degeneració del segon nivell excitat és:

A) 1
B) 2
C) 3
D) 4

5.- (1 punt) Per a l'ió Li^{2+} en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\phi_{3d_{+2}} + \phi_{3d_{+1}} + \phi_{3d_0} + \phi_{3d_{-1}} + \phi_{3d_{-2}}\right)$, la incertesa de L_z és

A) $0\hbar$
B) $1\hbar$
C) $\sqrt{2}\hbar$
D) $2\hbar$

6.- (1 punt) Quina de les següents funcions no és adequada per a usar-la com funció de prova variacional d'una partícula en una caixa de potencial de parets infinites entre (0,a)?

A) $\sin^2\left(\frac{\pi x}{a} + \frac{\pi}{2}\right)$
B) $x^3(a-x)^2$
C) $\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$
D) $x(x-a)$

7.- (1 punt) La degeneració d'un valor propi és

A) el nombre total de funcions pròpies que tenen el mateix valor propi.
B) el nombre total de funcions pròpies linealment independents que tenen el mateix valor propi.
C) el nombre total de funcions pròpies ortogonals entre si que tenen el mateix valor propi.
D) el nombre total de funcions pròpies normalitzades que tenen el mateix valor propi.

8.- (1 punt) Quina és la probabilitat que al mesurar L_z en l'àtom d'hidrogen en l'estat $2p_x$ obtinguem el valor $-1\hbar$:

A) 0,00
B) 0,25
C) 0,50
D) 1,00

9.- (1 punt) Indiqueu quin serà el valor de la constant de normalització N per a la funció $\psi = N\left(e^{-r} + (2-r)e^{-r/2}\right)$ que descriu l'estat d'un àtom d'hidrogen:

A) $\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
B) $\frac{1}{\sqrt{33\pi}}$
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}$
D) $\frac{3}{\pi\sqrt{113}}$

10.- (1 punt) Quina de les següents afirmacions sobre el mètode variacional és certa:

A) Les integrals variacionals sempre donen valors de l'energia superiors als valors exactes.
B) La funció de prova pot ser qualsevol funció que depengui de les coordenades de posició de les partícules del sistema.
C) No permet trobar energies dels estats excitats.
D) La funció variacional lineal dependrà del nombre de funcions de base escollides en el càlcul.

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *17 d'abril de 2009*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Digueu quin és l'operador associat a l'observable mòdul de la velocitat al quadrat (v^2) per a una partícula de massa *m* en moviment en l'espai

A) $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
B) $-\frac{\hbar^2}{m^2}\nabla^2$
C) $-\frac{i\hbar^2}{m^2}\nabla^2$
D) $\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2$

2 (1 punt) Quin és el valor esperat, en u.a., del mòdul al quadrat del moment angular orbital electrònic de l'ió Li^{2+} en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{2p_{+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{2p_{-1}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{1s}$

A) 0
B) 1
C) 4/3
D) 2

3 (1 punt) Donat un sistema en el seu estat fonamental, l'energia exacta d'aquest estat podem assegurar que serà
A) més gran o igual que la calculada amb teoria de pertorbacions fins a segon ordre.
B) més petita o igual que la calculada amb teoria de pertorbacions fins a segon ordre.
C) més gran o igual que la calculada amb el mètode variacional.
D) més petita o igual que la calculada amb el mètode variacional.

4 (1 punt) En un àtom d'hidrogen en l'estat descrit per la funció d'ona ψ_{2p_x} la incertesa en la component z del moment angular (L_z) és:

A) 0
B) $\hbar$
C) $\sqrt{2}\hbar$
D) $2\hbar$

5 (1 punt) Digueu en quin dels estats següents el valor esperat de l'operador $\hat{x}$ no és zero

A) Estat fonamental de la caixa de potencial unidimensional entre 0 i a.
B) Estat fonamental de l'oscil·lador harmònic.
C) Primer estat excitat de l'oscil·lador harmònic.
D) Estat fonamental de l'àtom d'hidrogen.

6 (1 punt) L'energia de l'estat fonamental d'una partícula en una caixa de potencial unidimensional per al interval *(0,a)* en la que $V(x) = -\frac{h^2}{8ma^2}$ és:

A) 0
B) $\frac{h^2}{8ma^2}$
C) $\frac{2h^2}{8ma^2}$
D) $\frac{4h^2}{8ma^2}$

7 (1 punt) Si els operadors hermítics $\hat{A}$ *i* $\hat{B}$ commuten, digueu quin dels següents operadors no és hermític

A) $\hat{A} + i\hat{B}$
B) $\hat{A}^2 - \hat{B}^2$
C) $\hat{A}\cdot\hat{B}$
D) $\hat{A}\cdot\hat{B} - \hat{B}\cdot\hat{A}$

8 (1 punt) Una partícula es troba en un estat on el moment angular orbital és 0. Si en un experiment d'Stern-Gerlach un feix d'aquestes partícules es descompon en 4, el seu spin, s, serà

A) –3/2
B) –1/2
C) +1/2
D) +3/2

9 (1 punt) Un sistema constituït per una partícula de massa m situada a una distància constant R de l'origen de coordenades té un hamiltonià $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2mR^2}$. La degeneració del tercer nivell excitat d'energia serà

A) 1
B) 3
C) 5
D) 7

10 (1 punt) Donades dues funcions d'ona qualssevol ψ_1 i ψ_2 de l'espai de funcions que descriuen el estat d'un sistema de hamiltonià $\hat{H}$, digueu quina de les següents afirmacions és falsa

A) $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ no és mai real.
B) $\langle\psi_1|\psi_1\rangle$ és sempre real.
C) $|\psi_1|^2$ és sempre real.
D) $\langle\psi_1|\hat{H}\psi_1\rangle$ és sempre real.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA
Departament de Química Física

16 d'abril de 2010

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si $\hat{V}(x)$ és l'operador energia potencial per a una partícula que es mou en una sola dimensió, quin serà el valor del commutador $\left[\hat{V}(x), \hat{p}_x\right]$ si $\hat{V}(x)$ és multiplicatiu?

A) $+i\hbar \dfrac{dV(x)}{dx}$
B) 0
C) $-i\hbar \dfrac{dV(x)}{dx}$
D) $+i\hbar \dfrac{d}{dx}$

2 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en un estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{1s} + \phi_{2p_x} + \phi_{3d_{+2}}\right)$. Indiqueu quina de les següents opcions correspon als possibles valors que es poden obtenir en mesurar L_z, ordenats de major a menor probabilitat d'obtenir-los.

A) P(+2) > P(+1) > P(0) > P(-1)
B) P(+2) = P(0) > P(+1) = P(-1)
C) P(+2) = P(+1) = P(0) = P(-1)
D) P(+2) = P(x) = P(0)

3 (1 punt) Una partícula d'spin 1/2 es troba en una caixa de potencial bidimensional quadrada. La degeneració del primer nivell excitat serà

A) 1
B) 2
C) 3
D) 4

4 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions referides al mètode variacional és certa:

A) Donades dues funcions de prova variacional, la millor aproximació a l'energia de l'estat fonamental la dóna sempre aquella per la qual el valor absolut de la integral variacional és més gran.
B) Si com a funció de prova variacional es fa servir la funció exacta corresponent a l'estat fonamental, la integral variacional dóna un valor igual a l'energia exacta.
C) En el mètode variacional lineal es tracta de buscar les funcions que minimitzen el valor de la integral variacional per a uns coeficients fixats.
D) En el mètode variacional lineal les funcions de la combinació lineal han d'estar normalitzades i ser ortogonals entre si.

5 (1 punt) Si emprem la funció de prova variacional $\psi = c_1\phi_{1s} + c_2\phi_{2s}$ per calcular l'aproximació a l'energia i la funció de ona del primer estat excitat de l'àtom d'hidrogen, els valors de c_1 i c_2 que obtindrem seran respectivament

A) 1 i 0
B) 0 i 1
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}$ i $\frac{1}{\sqrt{2}}$
D) 0,9954 i 0,1047

6 (1 punt) Si fem l'experiment de Stern-Gerlach amb una partícula d'spin 3/2, el feix de partícules es desdoblarà en

A) 1
B) 2
C) 4
D) 5

7 (1 punt) La constant de normalització de la funció $\psi = \phi_{2p_x}\alpha - \phi_{2p_{+1}}\alpha$ per a l'àtom d'hidrogen és

A) 0,70710
B) 1,00000
C) 1,30656
D) 1,41421

8 (1 punt) En els àtoms hidrogenoides la distància al nucli a la qual comença la zona clàssicament prohibida per a l'estat fonamental:

A) És més gran si el nombre atòmic Z és més gran.
B) És més petita si Z és més gran.
C) És 1 en unitats atòmiques independenment de Z.
D) És 2 en unitats atòmiques independentment de Z.

9 (1 punt) Els valors propis d'un operador associat a un observable A només són dos: +1 i -1. Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) En alguna mesura de A es pot obtenir el valor 0.
B) Hi ha algun estat pel qual el valor esperat d'A pot ser 1/2.
C) Hi ha algun estat pel qual el valor esperat d'A pot ser 2.
D) Hi ha algun estat pel qual el valor esperat d'A pot ser -2.

10 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) El valor de la funció que descriu l'estat d'un electró en un punt de l'espai ha de ser real.
B) La densitat de probabilitat de trobar un electró en un punt de l'espai pot ser negativa.
C) La probabilitat de trobar un electró en un determinat volum de l'espai ha de ser igual a 1.
D) La probabilitat de trobar un electró en un determinat volum de l'espai es pot determinar a partir de la probabilitat del trobar l'electró a la resta de l'espai.

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *12 d'abril de 2011*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\Psi = c_1\phi_{1s}\alpha + c_2\phi_{2p_x}\beta + c_3\phi_{3p_x}\alpha$. Si mesurem L_z i obtenim un valor de $+1\hbar$, l'estat del sistema just després de la mesura serà

A) propi d' $\hat{H}$ i d' $\hat{L}_z$.
B) propi d' $\hat{L}_z$ i d' $\hat{S}_z$.
C) propi d' $\hat{L}^2$ i d' $\hat{H}$
D) propi d' $\hat{L}_z$ i d' $\hat{L}^2$

2 (1 punt) Indiqueu quina de les següents funcions no és adequada com a funció de prova variacional per al cas de l'oscil·lador harmònic unidimensional:

A) $\Psi(x) = c_1 e^{-x} + c_2 x e^{-x/2}$
B) $\Psi(x) = c_1 e^{-x^2} + c_2 x^2 e^{-x^2/2}$
C) $\Psi(x) = N e^{-3x^2}$
D) $\Psi(x) = c_1 e^{-(x-3)^2} + c_2 x e^{-(x+3)^2}$

3 (1 punt) Una partícula en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites i d'extrems *0* i *a* es troba en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada $\Psi(x) = \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}\, x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. La probabilitat que en mesurar l'energia obtinguem el valor $\frac{h^2}{8ma^2}$ és

A) 0,3926
B) 0,6074
C) 0,6266
D) 1,0000

4 (1 punt) El commutador $\left[\frac{1}{2}k\hat{x}^2, \hat{p}_x\right]$, amb *k* constant, és igual a

A) 0
B) $i\hbar$
C) $i\hbar\frac{1}{2}k$
D) $i\hbar kx$

5 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) Els observables posició i moment lineal no són observables compatibles.
B) Dos operadors hermítics que només tenen espectre discret commuten si i solament si existeix un conjunt ortonormal i complet de funcions pròpies comunes als dos operadors.
C) El resultat de la mesura d'un observable només pot ser un dels valors propis de l'operador hermític associat a aquest observable.
D) El valor esperat de l'energia sempre ha de coincidir amb un dels valors propis de l'operador hamiltonià.

6 (1 punt) Si ψ és una funció que descriu l'estat d'un sistema, es compleix que $\hat{H}\psi = E\psi$

A) sempre.
B) mai.
C) només si l'estat ψ és un estat estacionari.
D) només si l'estat ψ és un estat no estacionari.

7 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) En el mètode variacional lineal les funcions de la combinació lineal han de ser sempre ortogonals entre si.
B) En el mètode variacional lineal no cal que les funcions de la combinació lineal estiguin normalitzadas.
C) En la teoria de pertorbacions sempre s'obtè un valor de l'energia superior a l'exacte.
D) En el mètode variacional no es pot obtenir mai el valor exacte de l'energia de l'estat fonamental.

8 (Tres apartats) La funció d'ona d'un electró en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites i amplària a, $x \in [0,a]$, en l'instant $t=0$ és $\psi(x;0) = \sqrt{\frac{2}{7}}\phi_1(x) + \sqrt{\frac{5}{7}}\phi_2(x)$, on $\phi_1(x)$ i $\phi_2(x)$ són els estats fonamental i primer excitat amb energies E_1 i E_2, respectivament, del sistema.

8.1 (1 punt) Quina serà la funció del sistema en un instant posterior t ?

A) $\psi(x;t) = \psi(x;0)e^{-iE_n t/\hbar}$

B) $\psi(x;t) = \sqrt{\frac{2}{7}}e^{-iE_n t/\hbar}\phi_1(x) + \sqrt{\frac{5}{7}}e^{-iE_n t/\hbar}\phi_2(x)$

C) $\psi(x;t) = e^{-iE_n t/\hbar}\left(\sqrt{\frac{2}{7}}\phi_1(x) + \sqrt{\frac{5}{7}}\phi_2(x)\right)$

D) $\psi(x;t) = \sqrt{\frac{2}{7}}e^{-iE_1 t/\hbar}\phi_1(x) + \sqrt{\frac{5}{7}}e^{-iE_2 t/\hbar}\phi_2(x)$

8.2 (1 punt) Si es mesura l'energia de l'electró en el instant $t=0$, quins valors podem obtenir i amb quina probabilitat?

A) E_n amb probabilitat 1.
B) E_1 amb probabilitat $\sqrt{\frac{2}{7}}$ i E_2 amb probabilitat $\sqrt{\frac{5}{7}}$.
C) E_1 amb probabilitat $\frac{2}{7}$ i E_2 amb probabilitat $\frac{5}{7}$.
D) E_1 amb probabilitat $\frac{4}{49}$, E_2 amb probabilitat $\frac{25}{49}$ i tots els valors més grans que E_2 amb probabilitat $\frac{20}{49}$.

8.3 (1 punt) Quin és el valor esperat de l'energia?

A) $\frac{E_1 + E_2}{2}$

B) $\frac{2E_1 + 5E_2}{7}$

C) E_n

D) $\frac{\sqrt{2}E_1 + \sqrt{5}E_2}{\sqrt{7}}$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *12 d'abril de 2012*

Universitat de Barcelona

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si l'estat d'un sistema ve descrit per una funció d'ona, ψ , que és combinació lineal de dues funcions pròpies del hamiltonià del sistema, ϕ_1 i ϕ_2 , llavors la funció d'ona ψ

A) segur que és pròpia del hamiltonià.
B) segur que no és pròpia del hamiltonià.
C) serà pròpia del hamiltonià només si les dues funcions ϕ_1 i ϕ_2 són linealment independents.
D) serà pròpia del hamiltonià només si les dues funcions ϕ_1 i ϕ_2 són degenerades.

2 (1 punt) La funció d'ona no normalitzada que descriu l'estat d'una partícula de massa *m* en una caixa de potencial unidimensional entre *0* i *a* és $\psi(x)=\sum_{n=1}^{5}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. El valor esperat de l'energia serà

A) $\frac{n^2h^2}{8ma^2}$
B) $\frac{11h^2}{8ma^2}$
C) $\frac{55h^2}{8ma^2}$
D) $\frac{5^2h^2}{8ma^2}$

3 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions referides als mètodes aproximats és certa:

A) amb el mètode pertorbatiu no es pot calcular l'aproximació a l'energia d'un estat excitat.
B) el mètode variacional lineal només serveix per calcular una aproximació a l'energia de l'estat fonamental.
C) el teorema variacional ens garanteix que obtindrem l'energia exacta de l'estat fonamental si la funció de prova variacional és la solució exacta.
D) la funció de prova variacional ha de contenir obligatòriament algun paràmetre variacional.

4 (1 punt) Una partícula de massa *m* que es mou en una sola dimensió *x* està sotmesa a un potencial $V(x)=\frac{1}{2}kx^2+qx^3+px^4$. Si utilitzem la funció $\psi(x)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha x^2/2}$, amb $\alpha=\sqrt{km}/\hbar$, com a funció de prova variacional, obtindrem una estimació de l'energia de l'estat fonamental igual a

A) 0
B) $\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}$
C) $\frac{3\hbar^2p}{4km}$
D) $\frac{1}{2}\hbar^2\frac{\alpha}{m}+\frac{3p}{4\alpha^2}$

5 (1 punt) En l'experiment d'Stern-Gerlach es fa passar un feix de partícules amb spin 5/2. En quants feixos es desdoblarà en passar per l'aparell?

A) 0
B) 2
C) 4
D) 6

6 (1 punt) Quina és l'energia d'ionització de l'ió Li^{2+} en el seu estat fonamental, en u.a.?

A) –0,5
B) +0,5
C) –4,5
D) +4,5

7 (1 punt) Quins són els valors de l'energia, L^2, L_z, S^2 i S_z, en u.a. , per a un estat de l'àtom d'H descrit pel spinorbital $\phi_{3d_{z^2}} \cdot \alpha$?

A) –1/8 , 2 , 0 , 1/2 , +1/2
B) –1/18 , 6 , 0 , 3/4 , +1/2
C) –1/18 , 3 , 0 , 1/2 , –1/2
D) –1/18 , 6 , +2 , 3/4 , +1/2

8 (1 punt) Quant val el commutador $\left[\hat{T},\hat{x}\right]$ per a una partícula de massa *m* que es mou en una sola dimensió?

A) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$
B) $-\frac{\hbar^2}{m}\frac{d}{dx}$
C) $-\frac{\hbar^2}{m}x\frac{d}{dx}$
D) 0

9 (1 punt) Per a una partícula sotmesa al següent potencial unidimensional: $V(x)=\frac{x-a}{b-a}$ si $x\in[a,b]$ i $V(x)=\infty$ si $x\notin[a,b]$, quina serà una funció de prova acceptable per poder aplicar el mètode variacional?

A) $\phi(x)=\sin(ax)$
B) $\phi(x)=(x-a)\cdot(x-b)$
C) $\phi(x)=x\cdot\sin(x-b)$
D) $\phi(x)=(x-a)\cdot\sin(bx)$

10 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) La mesura d'un observable físic pot modificar l'estat del sistema.
B) Per obtenir l'operador associat a una magnitud física he d'expressar-la en funció de les coordenades cartesianes de posició i moment.
C) Sempre es pot expressar la funció d'ona com una funció real.
D) Sempre es pot expressar la densitat de probabilitat com una funció real.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *8 d'abril de 2013*

Universitat de Barcelona

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si es vol normalitzar una funció corresponent a un ió hidrogenoide que només depèn explícitament de la variable r (com és el cas de la funció 1s), quin valor donarà la integració de la part angular ?

A) 2π
B) 4π
C) $(2\pi)^2$
D) $(4\pi)^2$

2 (1 punt) De quantes variables depèn la funció d'ona d'un sistema format per quatre partícules que es poden moure per tot l'espai, de les quals n'hi ha dues que tenen spin 1/2 i les altres dues spin 3/2 ?

A) 4
B) 8
C) 16
D) 32

3 (1 punt) En el mètode variacional lineal si es fa servir com a funció de prova $\Phi = c_1 f_1 + c_2 f_2$, indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) les funcions f_1 i f_2 han d'estar normalitzades.
B) les funcions f_1 i f_2 han de ser ortogonals.
C) el valor de la integral $< f_1 | f_2 >$ no depèn dels valors de c_1 i c_2.
D) el valor de la integral $< f_1 | \hat{H} | f_2 >$ depèn dels valors de c_1 i c_2.

4 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és correcta

A) dos valors propis diferents d'un operador hermític són sempre ortogonals.
B) dos valors propis iguals d'un operador hermític són sempre ortogonals.
C) dues funcions pròpies d'un operador hermític amb el mateix valor propi són sempre ortogonals.
D) dues funcions pròpies d'un operador hermític amb diferent valor propi són sempre ortogonals.

5 (1 punt) L'operador associat a un observable A d'un sistema té només dos valors propis, -1/2 i 1/2 . Indiqueu quina de les afirmacions següents és certa:

A) una mesura d'A pot donar qualsevol resultat comprès entre -1/2 i 1/2
B) pot haver algun estat per al qual, si mesurem A obtindrem el valor 0
C) pot haver algun estat per al qual el valor esperat d'A sigui 0
D) pot haver algun estat per al qual el valor esperat d'A sigui 1

6 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, relativa al mètode pertorbacional per a nivells no degenerats és certa:

A) per calcular la correcció d'ordre 1 a l'energia del nivell E_n es necessiten les funcions pròpies d' $\hat{H}^{(o)}$ dels nivells més propers al $E_n^{(o)}$
B) per calcular la correcció d'ordre 2 a l'energia del nivell E_n només es necessita la funció $\Phi_n^{(o)}$
C) la correcció d'ordre 1 a l'energia del nivell fonamental sempre és positiva.
D) la correcció d'ordre 2 a l'energia del nivell fonamental sempre és negativa.

7 (1 punt) L'estat d'un àtom d'hidrogen està descrit pel spinorbital $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s}\cdot\alpha + \phi_{2p_z}\cdot\beta\right)$ Indiqueu quina de les següents afirmacions és correcta:

A) Les mesures de S_z donaran sempre +1/2 u.a.
B) El valor esperat de l'energia serà -7/16 u.a.
C) Les mesures de L^2 donaran 0 o 2 u.a.
D) Les mesures de L_z donaran 0 o 1 u.a.

8 (1 punt) Si $\hat{A}\Phi_i = a_i\Phi_i$, quina de les afirmacions següents serà certa per l'operador $\hat{B} = c\cdot\hat{A} + d$ on c i d són constants reals?

A) les Φ_i no són funcions pròpies de $\hat{B}$.
B) les Φ_i són funcions pròpies de $\hat{B}$ amb valor propi a_i+d.
C) les Φ_i són funcions pròpies de $\hat{B}$ amb valor propi c•a_i+d.
D) les Φ_i són funcions pròpies de $\hat{B}$ amb valor propi c•a_i.

9 (1 punt) Quin és el valor esperat de l'energia potencial d'un oscil·lador harmònic unidimensional en l'estat $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_o(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_1(x)$ on $\phi_o(x)$ i $\phi_1(x)$ són funcions pròpies del seu hamiltonià?
(k i α tenen el seu significat habitual)

A) $\frac{7}{6}\frac{k}{\alpha}$
B) $2\frac{k}{\alpha}$
C) $\frac{7}{12}\frac{k}{\alpha}$
D) $\frac{1}{2}\frac{k}{\alpha}$

10 (1 punt) Quina és l'energia del segon nivell excitat d'un oscil·lador harmònic tridimensional amb $\nu_x=\nu_y=\nu_z=\nu$ i quina és la seva degeneració ?

A) (3/2)h.ν , 2
B) (5/2)h.ν , 4
C) (7/2)h.ν , 6
D) (9/2)h.ν , 8

Examen de Química Física III

(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *2 d'abril de 2014*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és certa:

A) L'energia aproximada de l'estat fonamental d'un sistema calculada mitjançant el mètode pertorbacional és sempre superior o igual al valor exacte.
B) El mètode variacional lineal permet obtenir aproximacions a les energies d'estats excitats d'un sistema.
C) Si coneixem el quadrat del mòdul del moment angular orbital d'una partícula, no podem conèixer la seva component x.
D) En un sistema de 2 partícules, la coordenada x d'una d'elles és incompatible amb el component p_x de l'altra.

2 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents relatives a un orbital hidrogenoide $2s$ és certa:

A) Té el mateix signe en tots els punts de l'espai.
B) Té un pla nodal.
C) Té una superfície esfèrica nodal.
D) Només s'anul·la en l'origen de coordenades.

3 (1 punt) El valor esperat de z per a un electró en un orbital hidrogenoide $2p_z$ (indiqueu l'afirmació correcta)

A) és positiu.
B) és negatiu.
C) és zero.
D) depèn del nombre atòmic Z de l'àtom.

4 (1 punt) En un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona
$\psi = \frac{1}{2}\phi_{1s} + \frac{1}{2}\phi_{2s} + \frac{1}{2}\phi_{2p_x} + \frac{1}{2}\phi_{3s}$ mesurem l'energia y obtenim el valor -1/8 hartrees. Quina serà la funció d'ona de l'àtom just després de la mesura?

A) ϕ_{2s}
B) ϕ_{2p_x}
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2s} + \phi_{2p_x}\right)$
D) ϕ_{3s}

5 (1 punt) Indiqueu quina de les funcions següents no és pròpia de l'operador energia cinètica d'una partícula que es mou al llarg de l'eix x.

A) x
B) x^2
C) e^{kx}
D) $\cos(kx)$

6 (1 punt) L'expressió de l'operador quàntic associat al component x del moment angular orbital d'una partícula, $\hat{L}_x$, és

A) $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$

B) $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\theta}$

C) $-i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z}-z\dfrac{\partial}{\partial y}\right)$

D) $-i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y}-y\dfrac{\partial}{\partial x}\right)$

7 (1 punt) Per a un ió Li^{2+} que es troba en l'estat excitat $\phi_{3d_{z^2}}\cdot\alpha$ indiqueu la seva energia, el quadrat del mòdul del moment angular orbital, el valor d'L_z i el quadrat del mòdul del moment angular d'spin en u.a.

A) $-\dfrac{1}{2}$, 6, 0, $+\dfrac{3}{4}$

B) $-\dfrac{1}{2}$, $\sqrt{6}$, 0, $+\dfrac{1}{2}$

C) $-\dfrac{1}{18}$, 6, 1, $+\dfrac{1}{2}$

D) $-\dfrac{9}{8}$, 2, 1, $+\dfrac{3}{4}$

8 (1 punt) Un oscil·lador harmònic bidimensional amb $k_x = k_y$, està en l'estat $\psi(x,y;t)=\dfrac{1}{\sqrt{6}}\phi_{00}(x,y)e^{-iE_{00}t/\hbar}+\sqrt{\dfrac{5}{6}}\phi_{01}(x,y)e^{-iE_{01}t/\hbar}$ on $\phi_{00}(x,y)$ i $\phi_{01}(x,y)$ són funcions pròpies del seu $\hat{H}$.
Indiqueu la resposta correcta:

A) El valor esperat de l'energia variarà amb el temps.
B) Els únics valors que es poden obtenir en mesurar l'energia són $h\nu$ i $3h\nu$.
C) La probabilitat d'obtenir E_{00} en mesurar l'energia és $\dfrac{1}{\sqrt{6}}$.
D) El valor esperat de y serà no nul.

9 (1 punt) Quina és l'energia, en u.a., que cal per ionitzar un àtom d'hidrogen que es troba en el seu segon estat electrònic excitat?

A) 1
B) 1/2
C) 1/8
D) 1/18

10 (1 punt) Digueu quina de les següents afirmacions en relació a la normalització de la funció d'ona és falsa:

A) El valor esperat d'un observable s'ha de calcular sempre amb la funció d'ona normalitzada.
B) La norma d'una funció d'ona pot ser un valor complex.
C) La densitat de probabilitat cal calcular-la sempre amb la funció d'ona normalitzada.
D) Tota funció d'ona de quadrat integrable té una norma finita.

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *10 d'abril de 2015*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Per a un àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental la probabilitat de trobar l'electró a una distància del nucli major que a és:

A) 0,054
B) 0,108
C) 0,159
D) 0,677

2 Per a un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per l'orbital hidrogenoide ϕ_{2s} (indiqueu l'afirmació *falsa*):

A) La densitat de probabilitat de trobar l'electró tendeix a zero quan aquest s'acosta al nucli.
B) La densitat de probabilitat s'anul·la en tots els punts d'una superfície esfèrica de radi $2a$ centrada al nucli.
C) La densitat de probabilitat no depèn de la direcció del vector posició de l'electró amb origen al nucli.
D) La densitat de probabilitat en un punt no canvia amb el temps.

3 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en l'instant t=0 en l'estat $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s}+\phi_{2p_1}\right)$. Quin serà el valor esperat de L_z en un instant t posterior?

A) 0
B) $\hbar$
C) $\hbar/2$
D) depèn de t

4 (1 punt) Per a una partícula sotmesa a una força o potencial central (indiqueu l'afirmació *falsa*):

A) El hamiltonià commuta amb $\widehat{L^2}$.
B) El hamiltonià commuta amb $\widehat{L_z}$.
C) L'operador $\widehat{L_x}$ commuta amb $\widehat{L_z}$.
D) Les funcions pròpies del hamiltonià es poden escollir com a productes d'una funció radial i una funció angular.

5 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en l'estat corresponent a la funció d'ona $\frac{1}{2}\left(\phi_{2s}+\phi_{2p_1}+\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$. Si fem una mesura ideal de l'energia de l'àtom la funció d'ona que descriurà el sistema immediatament després de la mesura serà (indiqueu l'afirmació *certa*):

A) $\frac{1}{2}\left(\phi_{2s}+\phi_{2p_1}+\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$
B) ϕ_{2s}
C) $\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{2p_1}+\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$
D) no ho podem predir amb certesa absoluta.

6 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions sobre l'spin de l'electró és *certa*:

A) La variable d'spin ω pot prendre el valor 3/4.
B) El nombre quàntic d'spin *s* pot prendre el valor -1/2.
C) La mesura de la component *z* del moment angular d'spin pot donar -1/2 (en u. a.).
D) La mesura del quadrat del mòdul del moment angular d'spin donarà 1/2 (en u. a.).

7 (1 punt) Sigui ψ la funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema amb hamiltonià $\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}$ (suposem que ψ és normalitzable; és a dir, de quadrat integrable). Llavors la igualtat $\left\langle \psi \middle| \widehat{H}\psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \widehat{T}\psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| \widehat{V}\psi \right\rangle$ es compleix (indiqueu l'afirmació *certa*):

A) només si ψ està normalitzada.
B) només si ψ es pròpia del hamiltonià.
C) només si ψ representa un estat no estacionari.
D) sempre.

8 (1 punt) Si apliquem el mètode variacional a un sistema emprant la funció de prova variacional lineal

$$\psi = c_0\chi_0 + c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + c_3\chi_3 + c_4\chi_4$$

on $\{\chi_0, \chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4\}$ són funcions reals, linealment independents, no normalitzades i no ortogonals entre elles, el nombre de files de les matrius **H** i **S** i el nombre mínim d'elements de cadascuna d'aquestes que haurem de calcular (tenint en compte que els elements iguals només s'han de calcular una vegada) són:

A) 4 i 6.
B) 4 i 10.
C) 5 i 10.
D) 5 i 15.

9 (1 punt) Una partícula es mou al llarg de l'eix *x* sota una energia potencial $V(x) = (1/2)kx^2 + dx^5$ on *k* i *d* són constants positives. Si aproximem les energies del sistema amb el mètode pertorbacional prenent com a sistema no pertorbat un oscil·lador harmònic de constant de força *k*, la correcció de primer ordre serà

A) 0 només per als estats amb nombre quàntic *n* parell (inclòs el zero).
B) 0 només per als estats amb nombre quàntic *n* senar.
C) 0 per a tots els estats.
D) $\neq 0$ per a tots els estats.

10 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és *certa* per a un oscil·lador harmònic tridimensional isòtrop ($k_x = k_y = k_z$):

A) El nivell fonamental és degenerat.
B) Només les energies dels estats excitats que tinguin els tres nombres quàntics diferents són degenerades.
C) Només les energies dels estats excitats que tinguin al menys un nombre quàntic diferent dels altres són degenerades.
D) Tots els nivells excitats tenen degeneració >1.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *10 d'abril de 2015*

Universitat de Barcelona

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Sigui ψ la funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema amb hamiltonià $\widehat{H}=\widehat{T}+\widehat{V}$ (suposem que ψ és normalitzable; és a dir, de quadrat integrable). Llavors la igualtat $\left\langle\psi\middle|\widehat{H}\psi\right\rangle=\left\langle\psi\middle|\widehat{T}\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|\widehat{V}\psi\right\rangle$ es compleix (indiqueu l'afirmació *certa*):

A) només si ψ es pròpia del hamiltonià.
B) només si ψ representa un estat no estacionari.
C) sempre.
D) només si ψ està normalitzada.

2 (1 punt) Una partícula es mou al llarg de l'eix x sota una energia potencial $V(x)= (1/2)kx^2+ dx^5$ on k i d són constants positives. Si aproximem les energies del sistema amb el mètode pertorbacional prenent com a sistema no pertorbat un oscil·lador harmònic de constant de força k, la correcció de primer ordre serà

A) 0 per a tots els estats.
B) 0 només per als estats amb nombre quàntic n senar.
C) 0 només per als estats amb nombre quàntic n parell (inclòs el zero).
D) $\neq 0$ per a tots els estats.

3 Per a un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per l'orbital hidrogenoide ϕ_{2s} (indiqueu l'afirmació *falsa*):

A) La densitat de probabilitat de trobar l'electró tendeix a zero quan aquest s'acosta al nucli.
B) La densitat de probabilitat s'anul·la en tots els punts d'una superfície esfèrica de radi $2a$ centrada al nucli.
C) La densitat de probabilitat no depèn de la direcció del vector posició de l'electró amb origen al nucli.
D) La densitat de probabilitat en un punt no canvia amb el temps.

4 (1 punt) Per a una partícula sotmesa a una força o potencial central (indiqueu l'afirmació *falsa*):

A) Les funcions pròpies del hamiltonià es poden escollir com a productes d'una funció radial i una funció angular.
B) El hamiltonià commuta amb $\widehat{L_z}$.
C) L'operador $\widehat{L_x}$ commuta amb $\widehat{L_z}$.
D) El hamiltonià commuta amb $\widehat{L^2}$.

5 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és *certa* per a un oscil·lador harmònic tridimensional isòtrop (k_x=k_y=k_z):

A) Tots els nivells excitats tenen degeneració >1.
B) Només les energies dels estats excitats que tinguin al menys un nombre quàntic diferent dels altres són degenerades.
C) Només les energies dels estats excitats que tinguin els tres nombres quàntics diferents són degenerades.
D) El nivell fonamental és degenerat.

6 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en l'estat corresponent a la funció d'ona $\frac{1}{2}\left(\phi_{2s}+\phi_{2p_1}+\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$. Si fem una mesura ideal de l'energia de l'àtom la funció d'ona que descriurà el sistema immediatament després de la mesura serà (indiqueu l'afirmació *certa*):

A) ϕ_{2s}
B) $\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{2p_1}+\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$
C) $\frac{1}{2}\left(\phi_{2s}+\phi_{2p_1}+\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$
D) no ho podem predir amb certesa absoluta.

7 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions sobre l'spin de l'electró és *certa*:

A) El nombre quàntic d'spin s pot prendre el valor -1/2.
B) La variable d'spin ω pot prendre el valor 3/4.
C) La mesura del quadrat del mòdul del moment angular d'spin donarà 1/2 (en u. a.).
D) La mesura de la component z del moment angular d'spin pot donar -1/2 (en u. a.).

8 (1 punt) Si apliquem el mètode variacional a un sistema emprant la funció de prova variacional lineal

$$\psi = c_0\chi_0 + c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + c_3\chi_3 + c_4\chi_4$$

on $\{\chi_0,\chi_1,\chi_2,\chi_3,\chi_4\}$ són funcions reals, linealment independents, no normalitzades i no ortogonals entre elles, el nombre de files de les matrius **H** i **S** i el nombre mínim d'elements de cadascuna d'aquestes que haurem de calcular (tenint en compte que els elements iguals només s'han de calcular una vegada) són:

A) 5 i 15.
B) 5 i 10.
C) 4 i 10.
D) 4 i 6.

9 (1 punt) Per a un àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental la probabilitat de trobar l'electró a una distància del nucli major que a és:

A) 0,677
B) 0,159
C) 0,108
D) 0,054

10 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en l'instant t=0 en l'estat $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s}+\phi_{2p_1}\right)$. Quin serà el valor esperat de L_z en un instant t posterior?

A) 0
B) $\hbar/2$
C) $\hbar$
D) depèn de t

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) **9 de gener de 2003**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

L'alumne que es retiri de l'examen haurà de lliurar aquest imprès al professor.
Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.
Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).
La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.
Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*Respostes de l'alumne*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1. (1 punt) Quina és l'energia mínima d'un oscil·lador harmònic bidimensional amb $\nu_x = \nu_y = \nu$?

A) 0

B) $(1/2)h\nu$

C) $h\nu$

D) $(3/2)h\nu$

2. (1 punt) Una partícula es troba en un estat en el que el mòdul del moment angular orbital és igual a $\sqrt{6}\hbar$. Quins valors pot prendre la component z d'aquest moment?

A) $\sqrt{6}\hbar, -\sqrt{6}\hbar$

B) $\sqrt{6}\hbar, 0, -\sqrt{6}\hbar$

C) $\sqrt{6}\hbar, \sqrt{5}\hbar, \ldots -\sqrt{6}\hbar$

D) $2\hbar, -2\hbar$

E) $2\hbar, 1\hbar, 0, -1\hbar, -2\hbar$

3. (1 punt) A partir d'una funció de quadrat integrable no normalitzada se'n pot obtenir una de normalitzada,

A) sempre.

B) només si el producte escalar amb si mateixa és diferent de 0.

C) només si el producte escalar amb si mateixa és diferent de 1.

D) mai.

4. (1 punt) Indiqueu quin dels següents valors pot prendre el valor esperat de l'energia d'un oscil·lador harmònic unidimensional.

A) $-(1/2)h\nu$

B) 0

C) $(1/4)h\nu$

D) $h\nu$

5. (1 punt) Dues funcions pròpies d'un operador hermític
A) han de ser ortogonals.
B) han de ser ortonormals.
C) han de ser ortogonals si corresponen a valors propis diferents.
D) han de ser ortonormals si corresponen a valors propis diferents.
E) han de ser ortogonals si corresponen al mateix valor propi.
F) han de ser ortonormals si corresponen al mateix valor propi.

6. (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions relatives a l'electró d'un àtom d'hidrògen en l'estat ϕ_{2pz}, és falsa.
A) La densitat de probabilitat s'anul·la en el pla xy.
B) La densitat de probabilitat canvia de signe si canviem la coordenada z de l'electró per $-z$.
C) L'únic punt (finit) de l'eixz z on s'anula la densitat de probabilitat és la posició del nucli.
D) La densitat de probabilitat en un punt de l'espai és la mateixa si es fan servir coordenades cartesianes que si s'utilitzen coordenades polars.

7. (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, relatives a dos observables d'un sistema, A i B, tals que $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, és falsa.
A) En mesurar un d'ells sempre queda determinat el valor de l'altre.
B) Poden haver estats en els que un d'ells tingui indeterminació nul·la i l'altre no.
C) Poden haver estats en els que ni l'un ni l'altre tinguin indeterminació nul·la.
D) Existeix un conjunt complet d'estats en els que els dos observables tenen indeterminació nul·la.

8. (1 punt) Un àtom d'hidrògen que es troba en el seu estat fonamental és sotmès a un camp eléctric constant d'intensitat F = 1 u.a., la qual cosa suposa un terme adicional eFz en el hamiltonià intern del sistema. Determineu la correcció pertorbacional de primer ordre a l'energia del sistema en unitats atòmiques.
A) 0
B) $1/(4\pi)$
C) $1/(2\pi)$
D) $1/(2\sqrt{\pi})$
E) $1/\sqrt{\pi}$

9. (2 punts) Calculeu el valor esperat, en unitats atòmiques, del quadrat del moment lineal ($\langle p_x^2 \rangle$) d'un electró que es troba en el primer nivell excitat d'una caixa de potencial unidimensional d'amplada 1 bohr.
A) 0
B) 1
C) 2π
D) π^2
E) $4\pi^2$

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) **14 de gener de 2004**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.

Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).

La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*en majúscules*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1.(1 punt) Siguin Φ_1 i Φ_2 dues funcions d'ona que representen estats estacionaris d'un sistema. Indiqueu quina de las afirmacions següents, referents a la funció $\Psi = c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2$, és certa.

A) Representa, necessàriament, un estat estacionari del sistema.

B) Només representa un estat estacionari si Φ_1 i Φ_2 són funcions pròpies de l'operador hamiltonià.

C) Només representa un estat estacionari si els coeficientes c_1 i c_2 són iguals en valor absolut.

D) Només representa un estat estacionari si Φ_1 i Φ_2 tenen la mateixa energia.

2.(1 punt) Indiqueu quina de las afirmacions següents és certa.

A) Si, just desprès de mesurar en un sistema un observable A i obtenir el resultat a, tornem a mesurar el mateix observable, és segur que obtindrem el valor a.

B) La funció d'ona $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\ \phi_{1s}\alpha + \frac{1}{\sqrt{2}}\ \phi_{2p_y}\beta$, on ϕ_{1s} i ϕ_{2p_y} són orbitals hidrogenoides, *no* descriu un estat d'un àtom hidrogenoide.

C) En mesurar l'energia cinètica d'un oscil·lador harmònic es pot obtenir un valor negatiu.

D) L'estat en que queda un sistema desprès de mesurar un observable qualsevol és estacionari.

3.(1 punt) Considereu dos sistemes: el primer constituït per dues partícules de masses m_1 i m_2 sense interacció entre elles i el segon format per dues partícules de masses m_1 i m_2 i càrregues q_1 i q_2 que interaccionen segons la llei de Coulomb. Indiqueu quina de les afirmacions següents, relatives als operadors energia cinètica d'aquests sistemes, és certa:

A) Són iguals.

B) Es diferencien només en el terme de repulsió.

C) Es diferencien només en el terme d'atracció.

D) Es diferencien només en el terme que inclou la massa reduïda del sistema.

4.(1 punt) L'operador associat a un observable A d'un sistema té, només, dos valors propis: 1 i –1. Indiqueu quina de les afirmacions següents és certa:

A) Una mesura d'A pot donar qualsevol valor real comprés entre 1 i –1.

B) Pot haver algun estat en el qual puguem assegurar que, si mesurem A, obtindrem el resultat 0.

C) Pot haver algun estat per al qual el valor esperat d'A sigui 1/2.

D) Pot haver algun estat per al qual el valor esperat d'A sigui 2.

5.(1 punt) Al mètode variacional lineal la funció de prova variacional s'expressa como a combinació lineal d'un conjunt determinat de funcions que han de (indiqueu l'afirmació certa):
A) complir les condicions de contorn del problema.
B) ser linealment dependents.
C) ser linealment *in*dependents i ortogonals entre elles.
D) ser degenerades entre elles.

6.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, relatives a un spinorbital, és certa:
A) És una funció monoelectrònica.
B) És una funció antisimètrica en front de la permutació d'electrons.
C) És una funció que ha de prendre necessàriament valors reals.
D) És una zona de l'espai on la probabilitat de trobar l'electró és del 90%.

7.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és certa:
A) La densitat de probabilitat de trobar un electró en un punt de l'espai pot ser negativa.
B) La funcio d'ona que descriu l'estat d'un sistema composat per 5 partícules depen de 3 variables.
C) La suma de dues funcions normalitzades es sempre una funció normalitzada.
D) L'aproximació que dona la funció de prova $\Psi(x) = c_1\, x(a–x) + c_2\, x^2(a–x)^2$ (on c_1 i c_2 són paràmetres optimitzats variacionalment) per a l'energia de l'estat fonamental d'una partícula en una caixa de potencial unidimensional és pitjor que la que dóna la funció $\Psi(x) = N\, x(a–x)$ (on N és la constant de normalització).
E) Cap de les anteriors.

8.(1,5 punts) Un electró que es mou sobre l'eix x es troba sotmès a una energia potencial harmònica i a un camp elèctric d'intensitat F, de manera que $V(x) = (1/2)kx^2 + eFx$. Si useu el mètode pertorbacional a primer ordre per estimar l'energia de l'estat fonamental del sistema obtindreu (ν i α estan definits en el formulari):
A) 0
B) $(1/2)h\nu$
C) $k/(4\alpha)$
D) $(1/2)h\nu + eF/(2\sqrt{\pi\alpha})$
E) $k/(8\alpha) + eF/(2\sqrt{\pi\alpha})$

9.(1,5 punts) Per a un oscil·lador harmònic unidimensional de massa m i constant de força k, el commutador de l'operador moment lineal amb l'hamiltonià és:
A) 0
B) $–i\hbar kx$
C) $–i\hbar k\{x–(x^2/2)\}$
D) $(i\hbar^3/2m)(d^3/dx^3)–i\hbar kx$

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) **14 de gener de 2005**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.

Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).

La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*en majúscules*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1.(1 punt) Per normalitzar la funció $\Phi = f_1 + 3f_2 + 2f_3$ hem de multiplicar-la per (indiqueu l'opció correcta):

A) $1/\sqrt{3}$, siguin quines siguin les funcions f_i.

B) $1/\sqrt{3}$, si les funcions f_i estan normalitzadas i són ortogonals.

C) $1/\sqrt{14}$, si les funcions f_i estan normalitzades i <u>no</u> són ortogonals.

D) $1/\sqrt{14}$, si les funcions f_i estan normalitzades i són ortogonals.

2.(1 punt) L'energia total d'una partícula en l'estat fonamental d'una caixa de potencial cúbica de volum b^3 és:

A) 0

B) $\dfrac{3h^2}{8ma^2}$

C) $\dfrac{h^2}{8mb^2}$

D) $\dfrac{3h^2}{8mb^2}$

3.(1 punt) Si s'aplica el mètode pertorbacional per estimar les energies d'un oscil·lador unidimensional anharmònic d'energia potencial $(1/2)kx^2 + qx^3$, les correccions de primer ordre a l'energia dels diferents nivells seran (indiqueu l'opció correcta):

A) totes positives.

B) totes negatives.

C) totes nul·les.

D) unes positives i les altres negatives.

4.(1 punt) Una raó vàlida per poder afirmar que els orbitals hidrogenoides ϕ_{2p_x} i ϕ_{2p_y} són ortogonals és (indiqueu l'opció correcta):

A) que són funcions pròpies del hamiltonià d'un àtom hidrogenoide amb valors propis diferents.

B) que són funcions pròpies de $\widehat{L_z}$ amb valors propis diferents.

C) que representen estats estacionaris degenerats d'un àtom hidrogenoide.

D) que un d'ells només depèn de la coordenada x i l'altre només depèn de la coordenada y.

E) Cap de les anteriors.

5.(1 punt) Per a un àtom d'hidrogen que es troba en el seu estat fonamental, la probabilitat de trobar l'electró a una distància del nucli més petita que 1 bohr és 0,32332. Quina serà la probabilitat de trobar-lo a una distància més petita que 1 bohr i amb un valor de l'angle θ comprès en l'interval (0, 90°)?

A) La mateixa, ja que l'orbital ϕ_{1s} té simetria esfèrica.
B) 0,16166
C) 0,08083
D) 0,040415

6.(1 punt) L'energia total d'un àtom d'heli en el seu estat fonamental és –2,9037 hartrees. Calculeu la seva primera energia d'ionització (energia necessària per arrencar-li un electró).

A) 0,9037 hartrees.
B) 2,4037 hartrees.
C) 2,9037 hartrees.
D) 2,0000 hartrees.

7.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a les funcions de spin α i β d'un electró, és certa.

A) Són funcions pròpies de $\widehat{S^2}$ però no de $\widehat{S_z}$.
B) Són funcions pròpies de $\widehat{S_z}$ però no de $\widehat{S^2}$.
C) Són les úniques funcions de spin pròpies de $\widehat{S^2}$ i de $\widehat{S_z}$.
D) Són dues d'entre les infinites funcions de spin pròpies de $\widehat{S^2}$ i de $\widehat{S_z}$.

8.(1 punt) Indiqueu quin dels valors següents pot ser imaginari:

A) el que pren la densitat de probabilitat de trobar una partícula en un punt de l'espai.
B) el que pren la probabilitat de trobar una partícula en una regió de l'espai.
C) el que pren en un punt de l'espai la funció que descriu l'estat d'una partícula.
D) el valor esperat d'una de les components del moment lineal d'una partícula.

9.(2 punts) El commutador dels operadors energia cinètica i energia potencial d'un oscil·lador harmònic unidimensional de massa *m* i constant de força *k* és igual a (indiqueu l'opció correcta):

A) 0
B) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{1}{2}kx^2\right)$
C) $-\frac{\hbar^2 k}{2m}\left(1+2x\frac{d}{dx}\right)$
D) $-\frac{\hbar^2 k}{2m}\left(1-\frac{x^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}\right)$
E) $-\frac{\hbar^2 k}{2m}\left(1+2x\frac{d}{dx}+\frac{x^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}\right)$

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

13 de gener de 2006

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

1 (1 punt) Un operador quàntic associat a un observable cal que sigui hermític perquè (indiqueu l'opció *certa*):

A) commuti amb el hamiltonià.
B) les seves funcions pròpies estiguin normalitzades.
C) els seus valors propis siguin reals.
D) els seus valors propis siguin no degenerats.

2 (1 punt) Indiqueu quin és el valor mínim que es pot obtenir en mesurar l'energia d'un oscil·lador harmònic tridimensional anisòtrop.

A) $\frac{1}{2}h\nu_x + \frac{1}{2}h\nu_y + \frac{1}{2}h\nu_z$
B) $\frac{3}{2}h\nu$
C) $h\nu_x + h\nu_y + h\nu_z$
D) $h\nu$

3 (1 punt) Indiqueu quina de les relacions de commutació següents, referents als operadors de moment angular orbital, és *falsa*.

A) $\left[\widehat{L_x}, \widehat{L_y}\right] = i\hbar\widehat{L_z}$
B) $\left[\widehat{L_z}, \widehat{L^2}\right] = 0$
C) $\left[\widehat{L_z}, \widehat{L_x}\right] = 0$
D) $\left[\widehat{L_z}, \widehat{L_z^2}\right] = 0$

4 (1 punt) En un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada

$$\phi = \frac{1}{2}(\phi_{2s} + \phi_{2p_x} + \phi_{2p_y} + \phi_{2p_z})$$

els valors esperats dels observables H i L^2, expressats en unitats atòmiques, són (indiqueu l'opció *certa*):

A) –1/4 i 3/4
B) –1/8 i 3/2
C) –1/4 i 3/2
D) –1/8 i 3/4

5 (2 punts) El valor esperat de l'energia cinètica de l'electró d'un àtom d'hidrogen que es troba en el seu estat fonamental és, en unitats atòmiques, (indiqueu l'opció *certa*):

A) –0,5
B) 0
C) 0,0796
D) 0,5
E) 0,796
F) 1

6 (1 punt) Un sistema amb un hamiltonià independent del temps es troba en un estat Ψ no estacionari. Si mesurem la seva energia i obtenim un valor E_i (de l'espectre discret del hamiltonià), podem assegurar que (indiqueu l'afirmació *falsa*)

A) l'estat del sistema després de la mesura és estacionari.
B) l'estat del sistema després de la mesura està descrit per una funció pròpia del hamiltonià amb valor propi E_i.
C) si, després d'efectuar la mesura, realitzem noves mesuras consecutives de l'energia sobre el mateix sistema obtindrem una mitjana de resultats igual a E_i.
D) si haguèssim efectuat moltes mesures de l'energia sobre sistemes iguals al considerat, tots en el mateix estat inicial Ψ, la mitjana dels resultats hauria estat E_i.

7 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a la mesura d'un observable A en un sistema que es troba en l'estat descrit per una funció d'ona normalitzada ϕ, és *falsa*.

A) El valor esperat d'A ha de coincidir amb algun dels valors que es poden obtenir en una mesura.
B) La suma de les probabilitats d'obtenir els diferents valors possibles en una mesura ha de valer 1.
C) En el cas que $\hat{A}$ només tingui espectre discret, la suma dels valors que es poden obtenir per les seves probabilitats dóna el valor esperat.
D) El valor esperat d'A es pot calcular així: $\langle A \rangle_\phi = \langle \hat{A}\phi | \phi \rangle$

8 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referida als harmònics esfèrics, és *certa*.

A) Són funcions pròpies de $\widehat{l^2}$ de valor propi l (en unitats atòmiques).
B) Són funcions pròpies de $\hat{l}_z$ de valor propi m (en unitats atòmiques).
C) Depenen dels nombres quàntics n i l.
D) Són funcions reals per a tot l i per a tot m.

9 (1 punt) Tenint en compte que $\phi_{3d_{xz}} = N_1\left(\phi_{3d_{+1}} + \phi_{3d_{-1}}\right)$ i $\phi_{3d_{yz}} = N_2\left(\phi_{3d_{+1}} - \phi_{3d_{-1}}\right)$, on $\phi_{3d_{+1}}$ i $\phi_{3d_{-1}}$ són orbitals hidrogenoides normalitzats, indiqueu quins dels valors següents són constants de normalització N_1 i N_2 vàlides.

A) 1; 1
B) $1/\sqrt{3}; 1/i\sqrt{3}$
C) $1/\sqrt{2}; 1/i\sqrt{2}$
D) $1/\sqrt{6}; 1/i\sqrt{6}$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Departament de Química Física

12 de gener de 2007

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) El commutador dels operadors $\hat{V} = \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$ i $\hat{p}_x$ és igual a:

A) $i\hbar\left(\frac{1}{2}cx^3 - \frac{1}{2}kx^2 + kx\right)$
B) $i\hbar\left(kx + 3cx^2\right)$
C) 0
D) $-i\hbar\left(kx^2 + 2cx^3\right)$

2 (1 punt) Si no considerem l'spin, els valors propis de l'energia de l'àtom d'hidrogen són:

A) n^2 vegades degenerats
B) $2n^2$ vegades degenerats
C) n(n+1) vegades degenerats
D) 2l+1 vegades degenerats

3 (1 punt) Per a un cert estat d'un àtom d'hidrogen, la probabilitat d'obtenir l'energia del nivell fonamental és el doble de la del primer nivell excitat. Sabent que qualsevol altre valor de l'energia té probabilitat zero, indiqueu quin és el valor esperat de l'energia (en unitats atòmiques) a l'estat considerat

A) $-\frac{1}{2}$
B) $-\frac{3}{8}$
C) $-\frac{5}{8}$
D) $-\frac{17}{72}$

4 (1 punt) L'espectre de valors propis de l'operador hamiltonià per a un sistema format per un protó i un electró

A) és tot discret
B) és tot continu
C) té una part discreta i una continua
D) compleix que E≥0

5 (1 punt) Un fermió és una partícula

A) d’spin 1
B) d’spin senar
C) d’spin semisenar
D) sense spin

6 (1 punt) Per què la primera derivada de la funció d’ona ha de ser contínua segons el primer postulat?

A) Perque la velocitat d’una partícula estarà ben definida.
B) Perque així la densitat de probabilitat és constant.
C) El primer postulat no diu tal cosa.
D) Perque és la manera d’assegurar que es pugui calcular la derivada segona en l’equació de Schrödinger.

7 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa pel que fa a l'spin d'un electró:

A) s pot valer $\frac{1}{2}$ o bé $-\frac{1}{2}$
B) $\hat{S}^2$ té dos valors propis
C) $\hat{S}_z$ té dos valors propis
D) α i β són funcions pròpies de $\hat{S}_z$ però no d' $\hat{S}^2$

8 (1 punt) Sigui una partícula de massa m en una caixa unidimensional de potencial d'extrems 0 i a. Si el potencial dins de la caixa és una constant k diferent de zero i fora de la caixa és infinit, indiqueu quins seran els valors propis del hamiltonià:

A) Els mateixos que la caixa amb potencial zero.
B) Els de l'oscil·lador harmònic.
C) Els de la caixa amb potencial zero multiplicats per k.
D) Els de la caixa amb potencial zero sumant-els-hi k.

9 (1 punt) En mesurar l’energia d’un àtom d’hidrogen trobem el valor $-\frac{1}{8}\mathit{hartree}$. Si immediatament després fem una mesura del component z del moment angular, quins seran tots els possibles valors que en principi es podrien obtenir?

A) 0
B) $+\hbar, -\hbar$
C) $0, +\hbar, -\hbar$
D) $+2\hbar, -2\hbar$
E) $0, +\hbar, -\hbar, +2\hbar, -2\hbar$

10 (1 punt) Quan s’aplica el mètode variacional a l’estudi d’un sistema, la funció de prova

A) pot ser qualsevol
B) ha de ser la funció pròpia del sistema sense pertorbar
C) ha de complir les condicions de contorn del sistema
D) no pot ser igual a la funció que descriu de manera exacta l’estat del sistema

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Departament de Química Física

11 de gener de 2008

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) La funció pròpia del hamiltonià d'una partícula lliure, $\psi = Ne^{ikx}$, no és estrictament una funció d'ona perquè

A) és una funció imaginària.
B) no és dues vegades derivable.
C) no és de quadrat integrable.
D) no és contínua.

2 (1 punt) Una partícula es troba en l'estat fonamental d'una caixa de potencial monodimensional de costat 0 ≤ z ≤ a. La funció d'ona d'aquest estat és pròpia de l'operador $\hat{p}_z^2$ amb valor propi (en u.a.)

A) $-i\dfrac{\pi}{a}$
B) $+i\dfrac{\pi}{a}$
C) $+\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2$
D) $-\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2$

3 (1 punt) Si Ψ és una funció pròpia d' $\hat{A}$ amb valor propi a, l'operador $\hat{B} = \hat{A} + b$ amb b constant tindrà com a funció pròpia i valor propi, respectivament:

A) Ψ,a
B) Ψ+a,b
C) Ψ+b,a
D) Ψ,a+b

4 (1 punt) Quina de les següents afirmacions sobre l'spin d'un electró és certa:

A) El nombre quàntic d'spin s d'un electró pot ser $\dfrac{1}{2}$ o bé $-\dfrac{1}{2}$.
B) La mesura del mòdul al quadrat del moment angular d'spin donarà sempre el mateix valor.
C) La mesura del mòdul al quadrat del moment angular d'spin donarà sempre un valor semi-senar (en u.a.).
D) La mesura del component z del moment angular d'spin donarà sempre un valor enter (en u.a.).

5 (1 punt) Qualsevol combinació lineal de funcions pròpies de l'operador moment angular al quadrat

A) és una funció pròpia dels operadors $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$.
B) és una funció pròpia dels operadors $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$.
C) és una funció pròpia de l'operador $\hat{L}^2$.
D) serà o no serà una funció pròpia de l'operador $\hat{L}^2$ depenent dels valors propis de les funcions combinades.

6 (1 punt) El hamiltonià i la funció d'ona de dues partícules que interaccionen mitjançant un potencial central

A) es pot expressar, respectivament, com a suma de hamiltonians i com a producte de funcions de dues partícules independents.
B) es pot expressar, respectivament, com a suma de hamiltonians i suma de funcions de dues partícules independents.
C) es pot expressar, respectivament, com a producte de hamiltonians i producte de funcions de dues partícules independents.
D) no es pot descomposar perquè les partícules interaccionen entre si i el hamiltonià no és separable.

7 (1 punt) El fet que l'operador quàntic associat a un observable físic sigui hermític no garanteix que

A) els valors propis d'aquest operador siguin reals.
B) els valors esperats d'aquest operador siguin reals.
C) les funcions pròpies d'aquest operador siguin reals.
D) les funcions pròpies amb diferent valor propi d'aquest operador siguin ortogonals entre si.

8 (1 punt) Indiqueu la afirmació correcta

A) El mètode variacional lineal aplicat a un sistema no pot donar mai l'energia exacta
B) El mètode variacional lineal aplicat a un sistema pot donar una energia menor que l'energia exacta
C) La teoria de pertorbacions condueix sempre a resultats millors que el mètode variacional
D) L'aproximació a l'energia obtinguda mitjançant la teoria de pertorbacions depèn de l'ordre del tractament pertorbacional

9 (1 punt) Siguin f i g dues funcions normalitzades i pròpies d'un operador hermític amb valor propi diferent. Indica quína de les següents relacions és falsa:

A) $\langle \hat{A}f | g \rangle = \langle f | \hat{A}g \rangle$
B) $\langle f | f \rangle = \langle g | g \rangle$
C) $\langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle$
D) $\langle f | g \rangle = 1$

10 (1 punt) En un àtom d'H, després de mesurar successivament l'energia, el quadrat del moment angular i el seu component z obtenim l'estat descrit per la funció $\phi_{2p_{+1}}$. Indica quina de les següents combinacions lineals seria un estat inicial compatible amb el resultat obtingut

A) $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2s} + \phi_{3s}\right)$

B) $\psi = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(2\phi_{2p_x} - \phi_{3p_x}\right)$

C) $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_0} - \phi_{3p_{-1}}\right)$

D) $\psi = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(\phi_{3p_{+1}} + 3\phi_{3d_{+1}}\right)$

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

16 de gener de 2009

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Indiqueu quina de les següents funcions no es pot aconseguir que sigui una bona funció d'ona per a una partícula en moviment unidimensional amb $x \in (-\infty, +\infty)$, d'acord amb el primer postulat:

A) xe^{x}
B) e^{-x^2}
C) $e^{-x^2} \sin x$
D) $\left(x^2 - 1\right)e^{-x^2}$

2 (1 punt) Si dos operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ conmuten es verifica, per qualsevol estat, la següent relació:

A) $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{B} \rangle$
B) $\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \geq 0$
C) $\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \leq 0$
D) $\Delta\hat{A} = \Delta\hat{B} = 0$

3 (1 punt) Quin és el valor esperat del moment lineal d'una partícula en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites descrita per la funció d'ona de l'estat fonamental:

A) *h/2a*
B) *-h/2a*
C) *0*
D) *h/a*

4 (1 punt) Indiqueu quina és la resposta correcta:

A) Els valors propis diferents d'un operador hermític són ortogonals
B) Els valors propis iguals d'un operador hermític són ortogonals
C) Qualsevol parella de funcions pròpies d'un operador hermític són ortogonals
D) Qualsevol parella de funcions pròpies d'un operador hermític amb diferents valors propis són ortogonals

5 (1 punt) L'energia del primer estat excitat d'un àtom hidrogenoide amb 4 protons és

A) més gran que la de l'àtom d'hidrogen a l'estat fonamental
B) més petita que la de l'àtom d'hidrogen a l'estat fonamental
C) igual que la de l'àtom d'hidrogen a l'estat fonamental
D) més gran que la de l'àtom d'hidrogen en el quart estat excitat

6 (1 punt) Es fan mesures consecutives de l'energia, d' $\hat{L}^2$ i d' $\hat{L}_z$ a un àtom d'hidrogen, obtenint repectivament els valors (en u.a.) de $-\frac{1}{8}$, 2 i -1. Indiqueu quin dels estats que s'indiquen és compatible amb l'estat inicial del sistema (abans d'efectuar cap mesura)

A) $\Psi = N\left(\varphi_{2p_1} + \varphi_{2p_0}\right)$
B) $\Psi = N\left(\varphi_{2p_0} + \varphi_{2p_1} + \varphi_{3d_{-1}}\right)$
C) $\Psi = N\left(\varphi_{3p_{-1}} + \varphi_{3p_y} + \varphi_{2p_z}\right)$
D) $\Psi = N\left(\varphi_{2p_x} + \varphi_{2p_y} + \varphi_{2p_z}\right)$

7 (1 punt) Si $\hat{A}, \hat{B}$ i $\hat{C}$ són tres operadors qualssevol, indiqueu la resposta correcta:

A) $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B}$
B) $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right] = \left[\hat{A}\hat{B},\hat{A}\hat{C}\right]$
C) $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right] = \left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{A}\right]$
D) $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right] = \left[\hat{B},\hat{C}\right]\hat{A}$

8 (1 punt) Per calcular l'energia d'un cert estat estacionari d'un oscil·lador harmònic tridimensional isòtrop ($k_x = k_y = k_z$) només cal conèixer

A) els nombres quàntics vibracionals i la freqüència vibracional associada a una de les dimensions.
B) els nombres quàntics vibracionals i la constant de força associada a una de les dimensions.
C) les freqüències ν_x, ν_y i ν_z i les corresponents constants de força.
D) les freqüències ν_x, ν_y i ν_z i el hamiltonià de la pertorbació.

9 (1 punt) En una caixa de potencial tridimensional cúbica de parets de potencial infinites, els valors de l'energia del nivell fonamental i primer excitat són, respectivament,

A) triplement degenerat i no degenerat.
B) no degenerats (ni l'un ni l'altre).
C) no degenerat i triplement degenerat.
D) triplement degenerats (l'un i l'altre).

10 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) La densitat de probabilitat de trobar un electró en un punt de l'espai pot ser negativa.
B) Si tenim un valor *a* de l'espectre discret d'un operador $\hat{A}$, llavors per mesura es poden obtenir valors diferents d'*a* però tant propers a ell com es vulgui.
C) Si dues funcions *f* i *g* estan normalitzades i són ortogonals entre sí, llavors *f*+*g* també està normalitzada.
D) L'operador energia cinètica d'una partícula lliure de massa *m* en una dimensió és el mateix que el d'un oscil·lador harmònic unidimensional de massa *m*.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *10 de gener de 2012*

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si en un instant donat un oscil·lador harmònic unidimensional, es troba en un estat descrit per la funció d'ona $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_0 + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_1 + c_2\phi_2$ on les funcions ϕ_v són pròpies del hamiltonià del sistema amb valors propis E_v, el valor esperat de l'energia en aquest instant és igual a:

A) $\frac{7}{6}h\nu$
B) $\frac{14}{\sqrt{12}}h\nu$
C) $\frac{9}{2}h\nu$
D) 0

2 (1 punt) Per a una partícula sotmesa a un potencial central qualsevol, s'acompleix que,

A) $\hat{H}$ i $\hat{L}^2$ commuten sempre
B) $\hat{H}$ i $\hat{L}^2$ no commuten mai
C) $\hat{H}$ i $\hat{L}^2$ poden commutar o no depenent de l'expressió del potencial
D) $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ no commuten mai

3 (1 punt) El commutador de dos operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ qualssevol és

A) un nombre real
B) un nombre complex
C) una funció
D) un operador

4 (1 punt) Dues funcions pròpies diferents d'un operador hermític

A) són sempre ortogonals si corresponen al mateix valor propi
B) han d'estar normalitzades si corresponen al mateix valor propi
C) són sempre ortogonals si corresponen a valors propis diferents
D) han d'estar normalitzades si corresponen a valors propis diferents

5 (1 punt) Si $\hat{A}$ és un operador amb només 3 valors propis, 0, -1 i -2, indiqueu quina de les següents afirmacions és certa si es fan moltes mesures d'*A*:

A) El valor esperat serà -1 en qualsevol estat
B) Pot ser que en algun estat només s'obtingui el valor -1
C) La probabilitat d'obtenir els valors 0 i -2 sempre serà la mateixa en qualsevol estat
D) Per a qualsevol estat s'obtindran tots 3 valors

6 (1 punt) Sigui una partícula en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites d'extrems 0 i a, amb una energia potencial V(x)=V a l'interior de la caixa (V constant i diferent de zero). Si comparem el sistema anterior amb un altre d'idèntic però amb V=0 a l'interior de la caixa:

A) Les funcions pròpies del hamiltonià seran les mateixes
B) Les funcions pròpies del hamiltonià seran les mateixes multiplicades per V
C) Els valors propis del hamiltonià seran els mateixos
D) Els valors propis del hamiltonià seran els mateixos multiplicats per V

7 (1 punt) Quina de les següents igualtats és certa ?

A) $\left[-\hat{L}_y, -\hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_z$
B) $\left[-\hat{L}_z, -\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_x$
C) $\left[-\hat{L}_x, -\hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_y$
D) $\left[-\hat{L}_y, -\hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x$

8 (1 punt) Per a un electró, quin dels següents valors (en u.a.) es pot obtenir fent una mesura d'S^2?

A) $\frac{1}{2}$
B) $\frac{3}{4}$
C) 1
D) $\frac{3}{2}$

9 (1 punt) Si s'aplica el mètode variacional al cas d'un oscil·lador harmònic unidimensional emprant una funció de prova del tipus $\Psi = c_0\phi_0 + c_1\phi_1$ on ϕ_0 i ϕ_1 són les funcions pròpies del hamiltonià del sistema amb valors propis, respectivament iguals, a E_0 i E_1, el millor valor que s'obtindrà de la integral variacional serà

A) més gran que E_0
B) més gran que E_1
C) igual que E_0
D) igual que E_1

10 (1 punt) Si s'aplica la teoria de pertorbacions, quina de les següents afirmacions és certa ?

A) Cal conèixer les funcions pròpies del sistema sense pertorbar però no cal conèixer els seus valors propis
B) La correcció de primer ordre dels nivells d'energia sempre és positiva
C) La correcció de segon ordre dels nivells d'energia sempre és positiva
D) El valor aproximat de l'energia de l'estat fonamental pot ser inferior a l'exacte

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III

(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *9 de gener de 2013*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si a un oscil·lador harmònic se'l sotmet a una pertorbació $\hat{H}' = cx^3 + dx^5$ (c i d constants molt petites)

A) la correcció de primer ordre de l'energia dels tres primers nivells serà igual per a tots tres.
B) la correcció de l'energia no es podrà calcular perquè la pertorbació conté dos termes.
C) la correcció de primer ordre de l'energia del primer estat excitat serà diferent de zero.
D) la correcció de primer ordre de l'estat fonamental serà diferent de zero.

2 (1 punt) Si una partícula en una caixa de potencial unidimensional amb $x \in [0,a]$ està en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)$, la probabilitat de trobar la partícula a la zona $x \in \left[\frac{a}{2}, a\right]$ és

A) igual a 0,5.
B) major que 0,5.
C) menor que 0,5.
D) igual a $\frac{2}{a}$.

3 (1 punt) Indiqueu quins seran els valors òptims dels paràmetres variacionals k_1 i k_2 si fem servir la funció $\phi(x) = k_1 \cos\left(\frac{\pi x}{a} + k_2\right)$ com a funció de prova variacional per obtenir una solució aproximada a l'estat fonamental d'una partícula en una caixa de potencial unidimensional amb $x \in [0,a]$

A) $k_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}$ i $k_2 = \frac{\pi}{2}$.
B) cap perquè aquesta funció no pot complir les condicions de contorn del sistema.
C) $k_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}$ i $k_2 = 0$.
D) $k_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ i $k_2 = \frac{\pi}{2}$.

4 (1 punt) El valor esperat de l'energia d'un àtom d'hidrogen en l'estat $\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{1s} e^{-iE_1 t/\hbar}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{2s} e^{-iE_2 t/\hbar}\beta$

A) és igual a -0.3125 Ha.
B) és igual a -0.25 Ha.
C) és igual a -0.0833 Ha.
D) és igual a l'energia de l'estat fonamental.

5 (1 punt) El producte de la incertesa en l'energia per la incertesa en el moment angular al quadrat en u.a. per a un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s} + \phi_{2p_z}\right)$

A) serà zero pel fet que $\left[\hat{H}, \hat{L}^2\right] = 0$.
B) serà igual a 0,1875.
C) serà igual a 0,0352.
D) serà més gran que 0,1875.

6 (1 punt) Si un oscil·lador harmònic unidimensional es troba en l'estat descrit per la funció d'ona no normalitzada $\psi = N\left(e^{-\alpha x^2/2} + x e^{-\alpha x^2/2}\right)$, la constant de normalització N és igual a

A) $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$

B) $\frac{1}{\sqrt{2}}$

C) $\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} + \left(\frac{\pi}{4\alpha^3}\right)^{1/2}}}$

D) 1

7 (1 punt) Indiqueu per a quin dels següents operadors la funció d'ona normalitzada $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{3s}\alpha + \phi_{3p_z}\beta + \phi_{3d_{z^2}}\alpha\right)$ que descriu l'estat en què es troba un àtom d'hidrogen no és pròpia.

A) $\hat{H}$

B) $\hat{S}^2$

C) $\hat{L}_z$

D) $\hat{L}^2$

8 (1 punt) Si $\hat{A}\Phi_i = a_i\Phi_i$, la probabilitat d'obtenir el valor a_3 en fer una mesura de l'observable A en un sistema que es troba a l'estat $\Psi = \frac{1}{\sqrt{5}}\Phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_2 + c_3\Phi_3$

A) és igual a la d'obtenir a_1 i a_2.

B) no es pot determinar.

C) és igual a $\sqrt{\frac{3}{10}}$.

D) és igual a $\frac{3}{10}$.

9 (1 punt) Una combinació lineal de funcions pròpies de l'operador hamiltonià amb el mateix valor propi

A) és pròpia de l'operador $\hat{L}^2$ ja que $\hat{L}^2$ i $\hat{H}$ commuten.

B) és pròpia dels operadors $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ ja que tots tres operadors commuten entre sí.

C) no és pròpia de l'operador $\hat{H}$ perquè no representa a un estat estacionari.

D) representa un estat estacionari.

10 (1 punt) Un electró que es troba en una caixa de potencial unidimensional d'amplada igual a $1a_0$, en el seu estat fonamental té una energia igual a

A) -0,5 Ha.

B) 0,0 Ha

C) $\frac{\pi^2}{2}$ Ha.

D) 0.125 Ha.

Examen de Química Física III

(test dels temes 1, 2 i 3)

Universitat de Barcelona
Departament de Química Física

8 de gener de 2014

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si en el mètode variacional lineal utilitzem un conjunt de n funcions linealment independents com a conjunt de base, si aquestes són ortogonals entre si,

A) simplificarem el càlcul de la matriu $\mathbf{H}$.
B) estarem aplicant malament el mètode perquè les funcions no poden ser ortogonals.
C) podem obtenir una energia per sota de l'energia exacta de l'estat fonamental.
D) simplificarem el càlcul de la matriu $\mathbf{S}$.

2 (1 punt) Les probabilitats que en mesurar L^2 i L_z en un àtom d'hidrogen en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{3d_{-1}} + \phi_{2p_x}\right)$ obtinguem els valors $2\hbar^2$ i $-\hbar$ són respectivament

A) 0,5 i 0,5
B) 1,0 i 0,0
C) 1,0 i 0,75
D) 0,5 i 0,75

3 (1 punt) La probabilitat que en mesurar l'energia d'una partícula de massa m en una caixa de potencial unidimensional d'extrems *0* i *a* en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi(x) = \sqrt{\frac{8}{3a}}\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ obtinguem el valor $\frac{h^2}{4ma^2}$ és

A) 0,00
B) 0,50
C) 0,96
D) 1,00

4 (1 punt) El valor esperat d'L^2 per a un àtom d'hidrogen en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\phi_{2s} + \phi_{2p_x} + \phi_{2p_y} + \phi_{3d_{xz}} + \phi_{3d_{xy}}\right)$ és en u.a.

A) 1,6
B) 2,0
C) 3,2
D) 8,4

5 (1 punt) Un feix de partícules d'spin 3/2 que passa entre els imants d'un muntatge de Stern-Gerlach, en quants feixos es desdoblarà?

A) 1
B) 2
C) 3
D) 4

6 (1 punt) Quina de les següents afirmacions referides a la teoria de pertorbacions aplicada al nivell fonamental (no degenerat) d'un sistema on $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$, és certa ?

A) Per calcular la correcció d'ordre 1 a l'energia del nivell cal conèixer la funció pròpia de $\hat{H}$.
B) La correcció d'ordre 1 a l'energia del nivell sempre és zero.
C) La correcció d'ordre 2 a l'energia del nivell és més senzilla de calcular que la d'ordre 1.
D) Les diferències d'energies que apareixen en el càlcul de la correcció de segon ordre són totes negatives.

7 (1 punt) Per a un oscil·lador harmònic monodimensional en un estat estacionari qualsevol indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) La densitat de probabilitat de trobar la partícula en $x = 0$ és més gran que per a qualsevol altre valor de x.
B) La probabilitat de trobar la partícula en la zona clàssicament permesa és més petita que 1.
C) La probabilitat de trobar la partícula entre 0 i ∞ és igual que la probabilitat de trobar la partícula entre $-\infty$ i 0.
D) La densitat de probabilitat de trobar la partícula en el punt x és la mateixa que la de trobar-la en el punt $-x$.

8 (1 punt) Si al mesurar un observable A en un sistema descrit per la funció ψ s'obté el valor a, indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) El valor a és propi de $\hat{A}$.
B) L'estat en el que queda els sistema immediatament després de la mesura és estacionari.
C) La funció que descriu l'estat del sistema immediatament després de la mesura és pròpia de $\hat{A}$.
D) Si tornem a mesurar A sense deixar passar el temps obtindrem de nou el valor a.

9 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents al moment angular d'spin d'un electró, és certa:

A) L'operador $\hat{S}^2$ té un sol valor propi.
B) El valor propi de $\hat{S}^2$ és $\frac{1}{2}\hbar^2$.
C) Una mesura de S^2 pot donar el valor $-\frac{1}{2}\hbar^2$.
D) Els valors propis de $\hat{S}_z$ són $\frac{1}{2}\hbar^2$ i $-\frac{1}{2}\hbar^2$.

10 (1 punt) El primer nivell excitat d'una partícula en una caixa de potencial tridimensional de costats $x \in [0,a]$, $y \in [0,2a]$ i $z \in [0,3a]$ és el que correspon a

A) $n_x = 0,\ n_y = 0,\ n_z = 1$
B) $n_x = 2,\ n_y = 1,\ n_z = 1$
C) $n_x = 1,\ n_y = 1,\ n_z = 2$
D) $n_x = 1,\ n_y = 2,\ n_z = 1$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *21 de gener de 2015*

Universitat de Barcelona

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Quin és el valor esperat de l'energia, en u.a., i la seva incertesa en l'estat $\psi = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\phi_{1s} + 2\phi_{2s}\right)$ per a l'ió He^{+}

A) -4/5 ; 1/5
B) -1/5 ; 2/5
C) -4/5 ; 3/5
D) -1/5 ; 3/5

2 (1 punt) Una partícula de massa m que es mou en una dimensió està sotmesa a un potencial $V(x) = +V_0$ per a $x \in \left[0, \frac{a}{2}\right]$, $V(x) = -V_0$ per a $x \in \left(\frac{a}{2}, a\right]$ i $V(x) = \infty$ per a $x \notin [0,a]$ amb V_0 molt petit. L'energia aproximada de l'estat fonamental és igual a

A) 0 B) V_0 C) $\frac{h^2}{8ma^2}$ D) $\frac{h^2}{8ma^2} + V_0$

3 (1 punt) El commutador $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right]$ és igual a

A) $\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{B}, \hat{C}\right]$
B) $\hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$
C) $\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right]$
D) $\hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right]$

4 (1 punt) En mecànica quàntica la funció d'ona ha de complir que

A) la seva integral a tot l'espai valgui 1.
B) la integral a tot l'espai del mòdul al quadrat valgui 1.
C) mai adopti valors imaginaris.
D) només s'anul·li en l'infinit.

5 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en un estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{19}}\left(\sqrt{2}\phi_{2p_x} + 2\phi_{2p_{+1}} + 3\phi_{3d_{+1}}\right)$.

Si mesurem la component z del moment angular i obtenim el valor $+\hbar$, l'estat del sistema just després de la mesura serà

A) $\phi_{2p_{+1}}$
B) $\phi_{3d_{+1}}$
C) $\frac{1}{\sqrt{13}}\left(2\phi_{2p_{+1}} + 3\phi_{3d_{+1}}\right)$
D) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_{+1}} + \phi_{3d_{+1}}\right)$

6 (1 punt) Si la funció d'ona $\psi(x)$ que descriu l'estat concret d'un sistema no és pròpia de l'operador $\hat{A}$, el resultat de la mesura de l'observable A

A) podrà ser qualsevol valor propi a_i d' $\hat{A}$.
B) serà sempre major al seu valor esperat $\langle A \rangle_\psi$.
C) serà sempre igual al seu valor esperat $\langle A \rangle_\psi$.
D) podrà ser qualsevol valor propi a_i d' $\hat{A}$ per al qual la seva probabilitat no sigui cero.

7 (1 punt) El valor esperat per a la velocitat d'un electró movent-se en el eix de les x és de 1000 km s^{-1}. Si la incertesa de la velocitat és d'un 0,02%, quina serà la incertesa en la seva posició?

A) $= 2{,}89 \cdot 10^{-7}$ m.
B) $= 2{,}89 \cdot 10^{-4}$ m.
C) $\geq 2{,}89 \cdot 10^{-7}$ m.
D) $\geq 2{,}89 \cdot 10^{-4}$ m.

8 (1 punt) Quines de les següents funcions: $sin(3x)$, $6 \cdot cos(4x)$, $5 \cdot x^3$, x^{-1} i $3 \cdot e^{-5x}$ són funcions pròpies de l'operador $\frac{d^2}{dx^2}$ amb valor propi positiu?

A) $3 \cdot e^{-5x}$
B) $5 \cdot x^3$; x^{-1}
C) $sin(3x)$; $6 \cdot cos(4x)$
D) $sin(3x)$; $6 \cdot cos(4x)$; $3 \cdot e^{-5x}$

9 (1 punt) En un sistema format per dues partícules independents que vibren harmònicament amb freqüències ν_e i $2\nu_e$, quina és l'energia del estat fonamental i la del segon estat excitat?

A) $h\nu_e$; $\frac{5}{2}h\nu_e$
B) $\frac{3}{2}h\nu_e$; $\frac{7}{2}h\nu_e$
C) $\frac{1}{2}h\nu_e$; $\frac{7}{2}h\nu_e$
D) $\frac{3}{2}h\nu_e$; $\frac{5}{2}h\nu_e$

10 (1 punt) Quina de les següents afirmacions en relació a la commutació dels operadors posició i moment lineal per a un sistema de dues partícules és falsa?

A) $\left[\hat{x}_1, \hat{p}_{x_1}\right] = i\hbar$
B) $\left[\hat{x}_1, \hat{p}_{y_1}\right] = 0$
C) $\left[\hat{x}_2, \hat{p}_{x_1}\right] = 0$
D) $\left[\hat{x}_1, \hat{p}_{x_2}\right] = i\hbar$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *19 de gener de 2016*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Dues partícules idèntiques de massa m_e, spin *0* i que no interaccionen estan en una caixa de potencial unidimensional de longitud a_0. L'energia dels 3 primers nivells, en u.a., i la seva degeneració seran

A) $E_1=0,\ d_1=1;\ E_2=\dfrac{\pi^2}{2},\ d_2=2;\ E_3=\pi^2,\ d_3=1$

B) $E_1=\pi^2,\ d_1=1;\ E_2=\dfrac{3\pi^2}{2},\ d_2=2;\ E_3=2\pi^2,\ d_3=1$

C) $E_1=\pi^2,\ d_1=1;\ E_2=\dfrac{5\pi^2}{2},\ d_2=2;\ E_3=4\pi^2,\ d_3=1$

D) $E_1=\dfrac{5\pi^2}{2},\ d_1=2;\ E_2=4\pi^2,\ d_2=1;\ E_3=5\pi^2,\ d_3=2$

2 (1 punt) Indiqueu quins valors s'obtindran per als paràmetres a, b i c si utilitzem la funció normalitzada $\varphi = e^{ax^2+bx+c}$ com a funció de prova variacional per calcular l'energia de l'estat fonamental d'un oscil·lador harmònic unidimensional:

A) $a=-\dfrac{\alpha}{2};\ b=0;\ c=0{,}25\cdot\ln\left(\dfrac{\alpha}{\pi}\right)$

B) $a=\dfrac{\alpha}{2};\ b=0;\ c=0{,}50\cdot\ln\left(\dfrac{\alpha}{\pi}\right)$

C) $a=-\dfrac{\alpha}{2};\ b=\alpha;\ c=0$

D) $a=-\alpha;\ b=0;\ c=0{,}25\cdot\ln\left(\dfrac{\alpha}{\pi}\right)$

3 (1 punt) Un oscil·lador harmònic unidimensional que està en l'estat $\psi = N\left(\sum_{i=0}^{4}\phi_i(x)\right)$, on $\phi_i(x)$ són les funcions pròpies del hamiltonià i N la constant de normalització, tindrà un valor esperat i una incertesa per a l'energia igual a

A) $\langle H\rangle = 2{,}5h\nu\,;\ \Delta_\psi H = \sqrt{2}h\nu$

B) $\langle H\rangle = 25{,}0h\nu\,;\ \Delta_\psi H = \sqrt{460}h\nu$

C) $\langle H\rangle = 12{,}5h\nu\,;\ \Delta_\psi H = \sqrt{115}h\nu$

D) $\langle H\rangle = 2{,}5h\nu\,;\ \Delta_\psi H = 2h\nu$

4 (1 punt) S'han fet mesures de L_z sobre un conjunt prou gran d'àtoms d'hidrogen independents entre si que es troben en el mateix estat. El 10% dels valors obtinguts ha estat 0 i la resta $-\hbar$. Quina de les següents funcions d'ona podria descriure l'estat d'aquests àtoms d'hidrogen:

A) $\psi = 0{,}3162\cdot\phi_{2p_z} + 0{,}9487\cdot\phi_{2p_x}$

B) $\psi = 0{,}1000\cdot\phi_{2p_z} + 0{,}9000\cdot\phi_{2p_{-1}}$

C) $\psi = 0{,}1414\cdot\phi_{1s} + 0{,}2828\cdot\phi_{2p_z} + 0{,}9487\cdot\phi_{2p_x}$

D) $\psi = 0{,}1414\cdot\phi_{1s} + 0{,}2828\cdot\phi_{2p_z} + 0{,}9487\cdot\phi_{2p_{-1}}$

5 (1 punt) Per a una partícula en una caixa de potencial unidimensional de longitud *a*, el mínim valor en la incertesa del moment lineal serà

A) $\frac{\hbar}{a}$ B) $\frac{\hbar}{2}$ C) $\frac{\hbar}{2a}$ D) 0

6 (1 punt) Siguin uns operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ tal que $\hat{A}\psi = a\psi$ i $\hat{B} = k\hat{A}$ on k és una constant real. L'operador $\hat{B}$ tindrà una funció pròpia amb el corresponent valor propi iguals, respectivament, a

A) ψ ; a
B) ψ ; ka
C) $k\psi$; a
D) $k\psi$; ka

7 (1 punt) La regió clàssicament prohibida per a l'electró d'un ió Li^{2+} en el seu orbital *2s* és la part exterior d'una esfera de radi

A) 1/3 a_0
B) 2/3 a_0
C) 4/3 a_0
D) 8/3 a_0

8 (1 punt) Si tenim dos operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ que no commuten, indiqueu l'afirmació certa:

A) Es complirà que $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = -\left[\hat{B},\hat{A}\right]$.
B) Totes les funcions pròpies d'$\hat{A}$ segur que també seran pròpies de $\hat{B}$.
C) No pot haver-hi cap funció pròpia d'$\hat{A}$ que sigui pròpia de $\hat{B}$.
D) El producte de la indeterminació d'$\hat{A}$ i de $\hat{B}$ en algun estat pot donar un nombre complex (no real).

9 (1 punt) Si tenim una partícula per la qual la mesura de la component *z* del moment angular d'spin, S_z, pot donar els valors +5/2,+3/2,+1/2,-1/2,-3/2 i -5/2 en u.a., indiqueu el valor en u.a. que pot donar la mesura de l'observable S^2:

A) 5/2
B) 5
C) 25/4
D) 35/4

10 (1 punt) Si apliquem la teoria de pertorbacions a un nivell d'energia no degenerat d'un sistema on $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$, quina de les següents afirmacions és certa?

A) «Nivell d'energia no degenerat» vol dir que el corresponent valor propi d'$\hat{H}'$ només té una funció linealment independent.
B) El valor de l'energia del nivell es pot desdoblar en dos quan es té en compte la pertorbació.
C) Per a calcular la correcció d'ordre 1 no cal conèixer la corresponent funció pròpia d'$\hat{H}^0$.
D) Si el nivell d'energia és el fonamental, la correcció d'ordre 2 a l'energia no pot ser positiva.

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *21 de juliol de 2009*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 9 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Si es mesura $\hat{L}_z$ en un àtom d'hidrogen en l'estat $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\psi_{2s} + \psi_{2d_{+1}} + \psi_{3d_0}\right)$ i s'obté com a resultat un valor igual a zero, la funció que descriu l'estat del sistema just després de la mesura és:

A) $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\psi_{2s} + \psi_{3d_0}\right)$
B) $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{2s} + \psi_{3d_0}\right)$
C) ψ_{2s}
D) ψ_{3d_0}

2 (1 punt) Indiqueu quina és la resposta falsa en relació a un oscil·lador harmònic unidimensional.

A) La probabilitat de trobar la partícula en zones clàssicament prohibides és nul·la.
B) La diferència entre nivells d'energia consecutius és constant.
C) L'energia del punt zero és no nul·la.
D) Les partícules amb massa més gran presenten nivells energètics més junts en comparació a les de menor massa, per al mateix valor de k.

3 (1 punt) Tenim una partícula de massa m en una dimensió i la seva energia potencial clàssica és $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + C$, on C és una constant. Els valors propis de $\hat{H}$ són de la forma:

A) $E_v = (v + \frac{1}{2})h\nu \;\; on \;\; \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$

B) $E_v = (v + \frac{1}{2})h\nu C \;\; on \;\; \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$

C) $E_v = (v + \frac{1}{2})h\nu + C \;\; on \;\; \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$

D) $E_v = (v + \frac{1}{2})h\nu \;\; on \;\; \nu = \frac{1}{2\pi C}\sqrt{\frac{k}{m}}$

4 (1 punt) La funció pròpia del hamiltonià d'una partícula lliure, $\psi = Ne^{ikx}$, no és estrictament una funció d'ona perquè

A) és una funció imaginària.
B) no és dues vegades derivable.
C) no és de quadrat integrable.
D) no és contínua.

5 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa referida a una partícula.

A) El valor de la funció d'ona en un punt de l'espai pot ser negatiu.
B) El valor de la densitat de probabilitat de trobar-la en un punt de l'espai pot ser negatiu.
C) El valor de la probabilitat de trobar-la en una zona de l'espai pot ser negatiu.
D) El valor del producte escalar de la funció per si mateixa pot ser negatiu.

6 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa respecte a les funcions pròpies Φ_v d'un oscil·lador harmònic unidimensional:

A) Φ_2 s'anul·la en $x=0$.
B) $|\Phi_3|^2$ s'anul·la en $x=0$.
C) $\langle \Phi_0 | \Phi_2 \rangle = 0$
D) $\langle \Phi_1 | \Phi_3 \rangle = 0$

7 (1 punt) Un fermió és una partícula

A) d'spin 1
B) d'spin senar
C) d'spin semisenar
D) sense spin

8 (1 punt) Un operador quàntic associat a un observable cal que sigui hermític per a que (indiqueu l'opció *certa*):

A) commuti amb el hamiltonià.
B) les seves funcions pròpies estiguin normalitzades.
C) els seus valors propis siguin reals.
D) els seus valors propis siguin no degenerats.

9 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a la mecànica quàntica, és falsa:

A) Tots els sistemes tenen una energia mínima no nul·la.
B) Les funcions d'ona que descriuen els sistemes reals han de ser de quadrat integrable.
C) L'energia d'un sistema no sempre està quantitzada.
D) Pot ocórrer que la mesura d'un observable A d'un sistema no alteri l'estat d'aquest.

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *11 de juliol de 2011*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1.- (1 punt) Per a un àtom d'hidrogen, indiqueu quina de les següents combinacions lineals és una funció d'ona real, que correspon a un estat estacionari i és pròpia de $\hat{L}_z$.

A) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s}+\phi_{2s}\right)$

B) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_0}+\phi_{2p_{-1}}\right)$

C) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_{-1}}+\phi_{3p_{+1}}\right)$

D) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{3s}+\phi_{3p_0}\right)$

2.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) L'operador energia cinètica d'una partícula lliure en una dimensió és el mateix que el d'un oscil·lador harmònic unidimensional.

B) Per trobar la correcció d'ordre 1 a l'energia d'un nivell no degenerat en la teoria de pertorbacions no és necessari conèixer totes les funcions pròpies de $\hat{H}^0$.

C) El valor de la funció que descriu l'estat d'un electró, en un punt de l'espai, pot ser real.

D) La densitat de probabilitat de trobar una partícula en un punt de l'espai no sempre és un valor real.

3.- (1 punt) La degeneració d'un valor propi a d'un operador $\hat{A}$ és d. Si c és una constant, quina és la degeneració del valor propi ca de l'operador $\hat{B}=c\hat{A}$?

A) d

B) $d+a$

C) cd

D) $c+d$

4.- (1,5 punts) L'energia del primer nivell excitat d'un oscil·lador harmònic tridimensional amb constants de força $k_x = 4k_y = 9k_z$ és igual a,

A) $\frac{5}{4}h\nu_x$

B) $\frac{11}{12}h\nu_x$

C) $\frac{1}{2}h\nu_x+\frac{4}{2}h\nu_y+\frac{9}{2}h\nu_z$

D) $\frac{1}{2}h\nu_x+h\nu_y+\frac{3}{2}h\nu_z$

5.- (1 punt) Quina de les següents funcions no és adequada per ser emprada com a funció de prova per a un sistema d'una partícula en una caixa monodimensional ($x \in [0,a]$) de parets infinites?

A) $\phi = x(x-a)e^{ia}$.
B) $\phi = x^n(x-a)$ amb n enter i positiu .
C) $\phi = (x-a)^n xe^{ia}$ amb n enter i positiu .
D) $\phi = (x+a)(x-a)$.

6.- (1 punt) L'orbital hidrogenoide ϕ_{2p_x} és una funció pròpia dels operadors

A) $\hat{H}$ i $\hat{L}_z$
B) $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$
C) $\hat{H}$ i $\hat{L}^2$
D) $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$

7.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions, referents a un oscil·lador harmònic monodimensional, és falsa:

A) La separació entre nivells energètics consecutius és constant.
B) Hi ha algun estat per al qual el valor esperat de l'energia pot ser zero.
C) La funció densitat de probabilitat és, per a tots els estats estacionaris, una funció de valor ≥ 0.
D) El valor esperat de la posició és zero per a tots els estats estacionaris amb nombre quàntic senar.

8.- (1,5 punts) El valor esperat de l'energia d'un oscil·lador harmònic monodimensional, amb una freqüència vibracional de 375 cm^{-1}, en un estat descrit per $\psi = \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1(x)$ (on ϕ_0 i ϕ_1 són, respectivament, les funcions pròpies de l'oscil·lador en l'estat fonamental i primer excitat) és igual a

A) $14{,}90 \cdot 10^{-21}$ J.
B) $9{,}496 \cdot 10^{-21}$ J.
C) $6{,}208 \cdot 10^{-21}$ J.
D) no es pot conèixer.

9.- (1 punt) La correcció d'ordre dos a l'energia per teoria de pertorbacions $\left(E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left|\left\langle \phi_k^0 \middle| \hat{H}' \middle| \phi_n^0 \right\rangle\right|^2}{E_n^0 - E_k^0} \right)$ de l'estat fonamental per a un sistema qualsevol

A) és sempre negativa.
B) és positiva si $E_n^0 > E_k^0$.
C) és positiva o negativa depenent del valor de la integral $\left\langle \phi_k^0 \middle| \hat{H}' \middle| \phi_n^0 \right\rangle$.
D) no es pot calcular per tractar-se de l'estat fonamental.

Examen de Química Física III (test de los temas 1, 2 y 3)   11 de junio de 2002

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nombre y apellidos: . . . . **Grupo:**

El alumno que se retire del examen debe entregar este impreso al profesor.
Hay una sola respuesta válida para cada cuestión.
Las respuestas incorrectas descuentan 1/4 de la puntuación de la cuestión (las cuestiones en blanco no descuentan). La puntuación indicada está referida a un total de 10 puntos para este test.
Las respuestas a cada cuestión deben trasladarse al siguiente casillero (*Respuestas del alumno*):

Cuestiones:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respuestas del alumno:									
Línea reservada para el profesor:									

1. (1 punto) Supón que al medir un observable A en un sistema descrito por una función de onda Ψ hemos obtenido el valor a. Indica cual de las afirmaciones siguientes es falsa.
a) El valor a es propio de $\hat{A}$.
b) El estado en el que queda el sistema inmediatamente después de la medida es estacionario.
c) El estado en el que queda el sistema inmediatamente después de la medida es propio de $\hat{A}$.
d) Seguro que si volviéramos a medir A inmediatamente después obtendríamos de nuevo a.

2. (1 punto) Indica cual de las afirmaciones siguientes, relativas a dos observables de un sistema, A i B, cuyos operadores conmutan entre sí, es verdadera.
a) A partir de la función de onda de un estado cualquiera del sistema podemos predecir con certeza los resultados que se obtendrán si se miden ambos observables.
b) Las funciones de onda del sistema son propias de ambos operadores a la vez.
c) Existe un conjunto completo de funciones de onda propias de ambos operadores a la vez.
d) Ninguna de las anteriores.

3. (1 punto) Indica cuál de las siguientes afirmaciones, referentes al orbital hidrogenoide ϕ_{2p_x}, es falsa.
a) Toma valores reales en todo el espacio.
b) Es una función propia de de $\hat{L}^2$ y de $\hat{L}_z$.
c) Representa un estado estacionario de un átomo hidrogenoide.
d) Es una función impar respecto de la coordenada x.

4. (1 punto) Indica cual de las siguientes afirmaciones referentes al método variacional lineal (método variacional con una función de prueba combinación lineal de funciones conocidas) es falsa.
a) Las funciones conocidas han de formar un conjunto ortonormal.
b) Nunca conduce a energías inferiores a la energía exacta del estado fundamental.
c) Proporciona aproximaciones a energías y funciones de onda de varios estados estacionarios del sistema.
d) El valor que proporciona para la energía del estado fundamental se aproxima al valor exacto (o se mantiene igual) al aumentar el número de funciones conocidas de la combinación lineal.

5. (1 punto) Para normalizar la función $\Phi = \phi_{2s} + 2\phi_{2p_0}$, donde ϕ_{2s} y ϕ_{2p_0} son orbitales hidrogenoides, hay que multiplicarla por:
a) 1/2
b) 1/3
c) 1/5
d) $1/\sqrt{2}$
e) $1/\sqrt{3}$
f) $1/\sqrt{5}$

6. (1 punto) Indica cuál de las siguientes afirmaciones, referentes a un oscilador armónico unidimensional, es falsa.
a) El espectro del hamiltoniano es discreto.
b) Una medida de la coordenada x en el estado fundamental puede producir un resultado 3 veces mayor que el máximo valor permitido por la mecánica clásica.
c) Una medida de la energía total puede dar cualquier valor positivo.
d) El valor esperado de la energía total puede ser hν.
e) La densidad de probabilidad del primer estado excitado es una función par de x.

7. (1 punto) Indica cual de la afirmaciones siguientes, relativas al spin de un electrón, es cierta.
a) Es (o tiene asociado) un momento angular.
b) Es proporcional al momento angular clásico.
c) Es consecuencia del giro del electrón sobre sí mismo.
d) Es consecuencia del giro del electrón sobre el núcleo.
e) El valor de S^2 para el electrón de un átomo de hidrógeno depende del estado del átomo.

8. (1 punto) ¿Por qué no se detecta cuantización en la energía de una pelota en una pista de squash?
a) Porque es un observable de espectro continuo.
b) Porque la mecánica cuántica no es aplicable a sistemas macroscópicos.
c) Porque la separación relativa entre niveles energéticos consecutivos es demasiado pequeña para poder ser detectada.
d) Ninguna de las anteriores.

9. (2 puntos) Si medimos la posición del electrón de un átomo de hidrógeno que se encuentra en su estado fundamental, la probabilidad de encontrarlo en la zona clásicamente permitida es
a) 0,1151
b) 0,2381
c) 0,7619
d) 0,8849
e) 1

Examen de Química Física III (test de los temas 1, 2 y 3) **10 de junio de 2003**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona

Nombre y apellidos: . . . . **Grupo:**

Hay una sola respuesta válida para cada cuestión.

Las respuestas incorrectas descuentan 1/4 de la puntuación de la cuestión (las cuestiones en blanco no descuentan). La puntuación indicada está referida a un total de 10 puntos para el test completo.

Las respuestas a cada cuestión han de trasladarse al casillero siguiente (*en mayúsculas*):

Cuestiones:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respuestas del alumno:									
Linea reservada para el profesor:									

1. (1 punto) Indica cual de las afirmaciones siguientes, referentes al método variacional lineal, es cierta.

A) Sólo proporciona aproximaciones al estado fundamental del sistema.

B) Se utiliza como función de prueba una combinación lineal de funciones conocidas que han de ser reales.

C) Las funciones fijas utilizadas para expresar la función de prueba han de constituir un conjunto completo.

D) Proporciona aproximaciones a tantos estados estacionarios como funciones fijas se hayan utilizado para expresar la función de prueba.

2. (1 punto) Las degeneraciones de los 3 primeros niveles de una partícula sin spin en un caja de potencial tridimensional cúbica son:

A) 1, 4, 9

B) 2, 8, 18

C) 3, 6, 9

D) 1, 3, 3

3. (1 punto) Indica cual de las afirmaciones siguientes, relativas a un spinorbital hidrogenoide, es falsa.

A) Es una función de onda que describe la interacción spin-órbita en un átomo hidrogenoide.

B) Es una función de onda que describe un estado estacionario de un átomo hidrogenoide.

C) Es una función de las coordenadas de posición espaciales y de spin de un electrón.

D) Es un producto de un orbital hidrogenoide por una función de spin.

4. (1 punto) La función de onda de un sistema en un instante t es $\Psi = \sqrt{1/4}\Phi_1 + \sqrt{3/4}\Phi_2$, donde Φ_1 y Φ_2 son funciones propias del hamiltoniano con energías diferentes E_1 y E_2, respectivamente. Indica las probabilidades de obtener los resultados E_1 y E_2 al medir la energía del sistema en dicho instante, y el valor esperado de la energía en el estado Ψ.

A) $\sqrt{1/4}$; $\sqrt{3/4}$; $\sqrt{1/4}E_1 + \sqrt{3/4}E_2$

B) 1/2; 3/2; $(1/2)E_1 + (3/2)E_2$

C) 3/4; 1/4; $(3/4)E_1 + (1/4)E_2$

D) 1/4; 3/4; $(1/4)E_1 + (3/4)E_2$

5. (1 punto) Para un oscilador armónico tridimensional, las indeterminaciones Δp_x y Δy

A) pueden tomar valores cualesquiera.

B) pueden tomar cualesquiera valores positivos.

C) puede tomar cualesquiera valores positivos tales que su producto sea $\geq \hbar/2$.

D) puede tomar valores cualesquiera, positivos o negativos, siempre que su producto sea $\geq \hbar/2$.

6. (1 punto) Indica cual de las afirmaciones siguientes, relativas al electrón de un átomo de hidrógeno en su estado fundamental, és cierta.

A) Describe órbitas circulares en torno al núcleo.

B) Describe órbitas elípticas en torno al núcleo.

C) Describe órbitas esféricas en torno al núcleo.

D) Ninguna de las anteriores.

7. (1 punto) Indica cual de las afirmaciones siguientes, relativas a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, es cierta.

A) Determina la evolución temporal de la función de onda de un sistema cuántico en tanto no se efectúen mediciones sobre el mismo.

B) Sólo es aplicable a sistemas cuánticos con hamiltonianos dependientes del tiempo.

C) Es indeterminista, ya que la función de onda en un instante no determina exactamente la función de onda en un instante posterior.

D) Permite conocer cómo evolucionará un sistema durante una medición de su energía total.

8. (1 punto) Indica cual de las afirmaciones siguientes, relativas a una partícula sometida a una fuerza central, es falsa.

A) Las tres componentes del momento angular están bien determinadas en cualquier estado estacionario del sistema.

B) Las funciones de onda de sus estados estacionarios pueden escogerse como productos de una función radial por un armónico esférico.

C) Las funciones de onda de sus estados estacionarios pueden escogerse propias de $\widehat{L^2}$ y de $\widehat{L_z}$.

D) La dependencia angular de las funciones de onda de sus estados estacionarios es la misma para cualquier energía potencial $V(r)$.

9. (2 puntos) Para un átomo de hidrógeno en el estado $2p_z$, la probabilidad de encontrar el electrón a una distancia del núcleo inferior a 'a_0' es (utiliza unidades atómicas):

A) 0

B) 0,00366

C) 0,0343

D) 0,996

E) 1

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) **9 de juny de 2004**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.

Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).
La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.
Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*en majúscules*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1. (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és falsa:

A) La mesura d'un observable A en qualsevol estat descrit per una funció d'ona que no sigui pròpia de l'operador $\hat{A}$ donará com a resultat $\langle A \rangle$.

B) L'espectre d'un operador pot tenir una part discreta i una altra contínua.

C) L'operador energia cinètica d'una partícula lliure (en una dimensió) és el mateix que el d'un oscil·lador harmònic unidimensional.

D) Dues funcions d'ona que difereixen en una constant multiplicativa de la forma $e^{i\alpha}$ representen el mateix estat físic.

2. (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a les funcions d'ona que descriuen estats estacionaris d'un sistema, és falsa:

A) Són pròpies del hamiltonià del sistema.

B) Compleixen l'equació de Schrödinger independent del temps.

C) Tenen densitats de probabilitat independents del temps.

D) Són pròpies de tots els observables que commuten amb el hamiltonià del sistema.

3. (1 punt) Tenint en compte que $\hat{L}_z = -i\hbar\, \partial/\partial\varphi$, indiqueu quina de les funcions següents no és pròpia de l'operador $\left(\hat{L}_z\right)^2$:

A) $\sin(\varphi)$

B) $\sin(\varphi) + 2\cos(\varphi)$

C) $\sin(\varphi) + \cos(2\varphi)$

D) $e^{i\varphi}$

4. (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a la funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema, és falsa:

A) Conté tota la informació física que podem tenir sobre l'estat considerat.

B) Permet determinar el resultat que s'obtindrà en mesurar un observable qualsevol.

C) Podem saber com evolucionarà amb el temps mentre no es facin mesures sobre el sistema.

D) Permet calcular el valor esperat de qualsevol observable del sistema.

5.(1 punt) En un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per l'orbital hidrogenoide ϕ_{2p_x} fem una mesura del component z del moment angular orbital de l'electró i obtenim com a resultat $\hbar$. En quin estat haurà quedat l'àtom després de la mesura?

A) ϕ_{2p_x}

B) ϕ_{2p_z}

C) $\phi_{2p_{+1}}$

D) $\phi_{2p_{-1}}$

6.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a una partícula sotmesa a una energia potencial central, és falsa.

A) Les funcions pròpies del hamiltonià només depenen de la distància de la partícula a l'origen de coordenades.

B) Existeix un conjunt complet d'estats estacionaris amb funcions d'ona pròpies de $\widehat{L^2}$.

C) Poden haver-hi estats estacionaris la funció d'ona dels quals sigui pròpia de $\widehat{L^2}$ però no de $\widehat{L_z}$.

D) Poden haver-hi estats estacionaris la funció d'ona dels quals sigui pròpia de $\widehat{L_z}$ però no de $\widehat{L^2}$.

7.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions seguents, referents al moment angular d'spin d'un electró ($\vec{S}$), és certa.

A) El valor propi de $\widehat{S^2}$ es $(1/2)\hbar^2$

B) Una mesura de S^2 pot donar el valor $(-1/2)\hbar^2$

C) Els valors propis de $\widehat{S_z}$ son $(1/2)\hbar^2$ i $(-1/2)\hbar^2$

D) L'operador $\widehat{S^2}$ té un sol valor propi.

8.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents al mètode variacional, és falsa.

A) Es pot agafar com a funció de prova una combinació lineal de funcións conegudes qualsevol, si compleixen les condicions de contorn que han de complir les funcions d'ona del sistema.

B) Es pot agafar com a funció de prova una combinació lineal de funcións pròpies d'un hamiltonià semblant al del sistema estudiat, si compleixen les mateixes condicions de contorn que les funcions d'ona d'aquest.

C) Es tracta d'un mètode aproximat i, per tant, en cap cas pot conduir a l'energia exacta del sistema.

D) Donades dues funcions de prova, permet saber quina d'elles condueix a una integral variacional més propera a l'energia exacta del sistema.

9.(2 punts) El valor esperat del component z del moment dipolar elèctric d'un àtom d'hidrogen ($d_z = -ez$) en l'estat descrit per la funció d'ona $\phi = (1/\sqrt{2})(\phi_{1s}+\phi_{2p_z})$ (ϕ_{1s} i ϕ_{2p_z} són orbitals hidrogenoides) és, en unitats atòmiques,

A) 0

B) –0,3291

C) –0,6582

D) –0,7449

E) –1,4899

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA
Departament de Química Física

10 de juny de 2005

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten). La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.
Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent en majúscules (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

Qüestió:	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Resposta:									

1 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a una partícula amb nombre quàntic de spin s = 3/2, és certa:
A) La component z del moment angular d'spin només pot prendre el valor 3/2 en unitats atòmiques.
B) La component z del moment angular d'spin només pot prendre els valors ±3/2 en unitats atòmiques.
C) El quadrat del mòdul del moment angular d'spin només pot prendre el valor 3/2 en unitats atòmiques.
D) El quadrat del mòdul del moment angular d'spin només pot prendre els valors ±3/2 en unitats atòmiques.
E) El quadrat del mòdul del moment angular d'spin només pot prendre el valor 15/4 en unitats atòmiques.

2 (1 punt) La correcció pertorbacional de segon ordre a l'energia de l'i-èssim estat estacionari (no degenerat) d'un sistema ve donada per l'expressió: $E_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{\left| \left\langle \Phi_j^{(0)} \middle| \hat{H}' \Phi_i^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}}$. Per a l'estat fonamental aquesta correcció (indiqueu l'afirmació correcta):
A) és sempre ≥ 0.
B) és sempre ≤ 0.
C) pot ser positiva, negativa o nul·la depenent de la pertorbació.
D) pot ser positiva, negativa o nul·la depenent dels valors que prenguin les energies no pertorbades.

3 (1 punt) Una de les opcions següents proporciona valors per als coeficients c_1, c_2 i c_3 d'una funció $\Phi_a = c_1\Phi_{1s} + c_2\Phi_{2p_x} + c_3\Phi_{2p_y}$ que fan que aquesta estigui normalitzada i sigui ortogonal a la funció $\Phi_b = (4/5)\Phi_{1s} + (3/5)\Phi_{2p_x}$, on Φ_{1s}, Φ_{2p_x} y Φ_{2p_y} són orbitals hidrogenoides. Indiqueu quina es l'esmentada opció:
A) $c_1 = -4/5,\ c_2 = 3/5,\ c_3 = 0$.
B) $c_1 = 3/5,\ c_2 = -4/5,\ c_3 = 6/5$.
C) $c_1 = 3/\sqrt{50}\,,\ c_2 = -4/\sqrt{50}\,,\ c_3 = 0$.
D) $c_1 = 3/\sqrt{50}\,,\ c_2 = -4/\sqrt{50}\,,\ c_3 = 5/\sqrt{50}$.

4 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a la mecànica quàntica, és falsa:
A) Tots els sistemes tenen una energia mínima no nul·la.
B) Les funcions d'ona que descriuen els sistemes reals han de ser de quadrat integrable.
C) L'energia d'un sistema no sempre està quantitzada.
D) Pot ocórrer que la mesura d'un observable A d'un sistema no alteri l'estat d'aquest.

5 (1 punt) Un oscil·lador harmònic unidimensional es troba, en l'instant $t = 0$, en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada: $\Psi = (2/3)\Phi_0 + (2/3)\,\Phi_1 + (1/3)\,\Phi_2$, on Φ_0, Φ_1 i Φ_2 són les funcions d'ona dels tres estats estacionaris d'energies més baixes. Si mesurem l'energia del sistema en aquest instant, la probabilitat d'obtenir un valor superior a l'energia de l'estat fonamental és:
A) 1/3
B) 2/3
C) 1/9
D) 4/9
E) 5/9
F) 1

6 (1 punt) El primer nivell excitat d'una partícula en una caixa de potencial tridimensional de costats $x \in (0, a)$, $y \in (0, 2a)$, i $z \in (0, 3a)$ és el que correspon a (indiqueu l'opció correcta):
A) $n_x = 1, n_y = 0, n_z = 0$.
B) $n_x = 0, n_y = 0, n_z = 1$.
C) $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$.
D) $n_x = 1, n_y = 1, n_z = 2$.

7 (1 punt) El valor que pren en un punt de l'espai la funció d'ona que descriu l'estat d'una partícula sense spin (indiqueu l'afirmació correcta):
A) ha de ser positiu.
B) ha de ser més petit o igual a la unitat.
C) ha de ser real.
D) pot ser complexe.

8 (1 punt) Considereu un oscil·lador harmònic tridimensional isòtrop ($k_x = k_y = k_z = k$) de massa m i càrrega q. Si posem una càrrega q' fixa en l'origen de coordenades (el punt on la força clàssica és zero), el hamiltonià de l'oscil·lador serà (indiqueu l'opció correcta):

A) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\dfrac{1}{2}kr^2+\dfrac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r}$

B) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+\dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\right)+\dfrac{1}{2}kr^2+\dfrac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r}$

C) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\dfrac{1}{2}kx^2+\dfrac{1}{2}ky^2+\dfrac{1}{2}kz^2+\dfrac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 x}+\dfrac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 y}+\dfrac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 z}$

D) $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\dfrac{1}{2}kx^2+\dfrac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r}$

9 (2 punts) Per a un àtom d'hidrogen que es troba en el seu estat ϕ_{2p_z}, la probabilitat de trobar l'electró a una distància del nucli més petita que a_0 és (feu l'aproximació $\mu = m_e$):
A) 0,0037
B) 0,1586
C) 0,8414
D) 0,9963

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Departament de Química Física

16 de juny de 2006

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Sigui un operador $\hat{A}$ i una funció ϕ tal que $\hat{A}\phi = a\phi$. L'operador $\hat{B} = \hat{A} + 3$ tindrà una funció pròpia amb el corresponent valor propi iguals, respectivament, a:

A) ϕ ; a
B) ϕ ; a+3
C) ϕ +3 ; a
D) ϕ +3 ; a+3

2 (1 punt) En el mètode pertorbacional la correcció de primer ordre a l'energia depèn

A) de les funcions pròpies pertorbades
B) de l'hamiltonià del sistema sense pertorbar
C) de les funciones pròpies de l'hamiltonià del sistema no pertorbat
D) de les correccions a l'energia d'ordres superiors

3 (1 punt) Indiqueu quin dels valors següents no pot ser valor esperat de l'energia d'una partícula de massa *m* en una caixa de potencial unidimensional d'amplada *a*:

A) 0
B) $h^2/8ma^2$
C) $2h^2/8ma^2$
D) $4h^2/8ma^2$

4 (1 punt) Un oscil·lador harmònic tridimensional sense spin amb constants de força k_x, k_y i k_z té estats degenerats respecte de l'hamiltonià (indiqueu l'opció certa)

A) sempre
B) mai
C) només per als estats descrits per funcions parelles o senars
D) només per a certes relacions entre les constants k_x, k_y i k_z

5 (1 punt) Indiqueu quina de les seguents afirmacions és falsa:

A) La suma de dos operadors és un operador.
B) El producte d'un escalar per un operador és un operador.
C) El producte de dos operadors és un operador.
D) El commutador de dos operadors és un escalar.

6 (1,5 punts) Quina és la probabilitat de trobar l'electró a una distància menor de $3a_0$ centrada en el nucli d'un àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental?

A) 50%
B) 99,5%
C) 93,8%
D) 90%

7 (1 punt) En un sistema tridimensional amb un hamiltonià total $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$ tal que $\hat{H}_x\phi_x = E_x\phi_x$, $\hat{H}_y\phi_y = E_y\phi_y$ i $\hat{H}_z\phi_z = E_z\phi_z$ sent ϕ_x, ϕ_y i ϕ_z normalitzades

A) una de les funcions pròpies de l'hamiltonià és $N(\phi_x + \phi_y + \phi_z)$, amb *N* constant de normalització
B) l'energia del sistema és $N(E_x + E_y + E_z)$, amb *N* constant de normalització
C) l'energia del sistema és $E_x \cdot E_y \cdot E_z$
D) una de les funcions pròpies de l'hamiltonià és $\phi_x \cdot \phi_y \cdot \phi_z$

8 (1 punt) Per a un oscil.lador harmònic monodimensional, el producte escalar de les funcions definides com a $\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 + \phi_1)$ i $\varphi_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 - \phi_2)$, on ϕ_0, ϕ_1 i ϕ_2 són funcions pròpies de l'hamiltonià, és

A) 0
B) $\frac{1}{2}$
C) $\frac{3}{2}$
D) $\frac{1}{\sqrt{2}}$
E) $\frac{3}{\sqrt{2}}$

9 (1,5 punts) En una dimensió, el conmutador dels operadors energia cinètica i posició, $\left[\hat{T}_x, \hat{x}\right]$, és igual a:

A) 0
B) $-\frac{h^2}{4\pi^2 m}\frac{d}{dx}$
C) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}$
D) $-\frac{2\hbar^2}{m}\frac{d}{dx}$

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

8 de juny de 2007

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1.- (1 punt) Per a un àtom d'hidrogen, indiqueu quina de les següents combinacions lineals és una funció d'ona real, que correspon a un estat estacionari i és pròpia de $\hat{L}^2$.

A) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2s}+\phi_{3s}\right)$

B) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_{+1}}+\phi_{2p_{-1}}\right)$

C) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_{+1}}+\phi_{3p_{-1}}\right)$

D) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2s}+\phi_{2p_0}\right)$

2.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) L'operador energia cinètica d'una partícula lliure en una dimensió és el mateix que el d'un oscil·lador harmònic unidimensional

B) Per trobar la correcció d'ordre 1 a l'energia d'un nivell no degenerat en la teoria de pertorbacions és necessari conèixer totes les funcions pròpies de $\hat{H}^0$.

C) El valor de la funció que descriu l'estat d'un electró, en un punt de l'espai, pot ser real.

D) La densitat de probabilitat de trobar una partícula en un punt de l'espai és sempre un valor real.

3.- (1 punt) La degeneració d'un valor propi *a* d'un operador $\hat{A}$ és g. Si *k* és una constant, quina és la degeneració del valor propi *ka* de l'operador $\hat{B}=k\hat{A}$?

A) g

B) g+a

C) kg

D) k+g

4.- (1,5 punts) L'energia de l'estat fonamental d'un oscil·lador harmònic tridimensional amb constants de força $k_x = 4k_y = 9k_z$ és igual a,

A) $\frac{3}{2}h\nu_x$

B) $\frac{11}{12}h\nu_x$

C) $\frac{1}{2}h\nu_x+\frac{4}{2}h\nu_y+\frac{9}{2}h\nu_z$

D) $\frac{1}{2}h\nu_x+h\nu_y+\frac{3}{2}h\nu_z$

5.- (1 punt) Quina de les següents funcions no és adequada per ser emprada com a funció de prova per a un sistema d'una partícula en una caixa monodimensional ($x \in [0,a]$) de parets infinites?

A) $\phi = x\,(x-a)$
B) $\phi = x^n\,(x-a)$ amb n enter i positiu
C) $\phi = (x+a)\,(x-a)$
D) $\phi = (a-x)^n\,x$ amb n enter i positiu

6.- (1 punt) L'orbital hidrogenoide ϕ_{2p_y} és una funció pròpia dels operadors

A) $\hat{H}$ i $\hat{L}^2$
B) $\hat{H}$ i $\hat{L}_z$
C) $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$
D) $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$

7.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions, referents a un oscil·lador harmònic monodimensional, és falsa:

A) La separació entre nivells energètics consecutius és constant.
B) El valor esperat de l'energia pot ser qualsevol valor real positiu.
C) La funció densitat de probabilitat és, per a tots els estats estacionaris, una funció parella.
D) El valor esperat de la posició és zero per a tots els estats estacionaris.

8.- (1,5 punts) El valor esperat de l'energia d'un oscil·lador harmònic monodimensional, amb una freqüència vibracional de 325 cm^{-1}, en un estat descrit per $\psi = \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1(x)$ (on ϕ_0 i ϕ_1 són, respectivament, les funcions pròpies de l'oscil·lador en l'estat fonamental i primer excitat) és igual a

A) no es pot conèixer
B) $5{,}380 \cdot 10^{-21}$ J
C) $8{,}230 \cdot 10^{-21}$ J
D) $12{,}91 \cdot 10^{-21}$ J

9.- (1 punt) La correcció d'ordre dos a l'energia per teoria de pertorbacions ($E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left|\langle \phi_k^0 | \hat{H}' | \phi_n^0 \rangle\right|^2}{E_n^0 - E_k^0}$) de l'estat fonamental per a un sistema qualsevol

A) és sempre negativa
B) és sempre positiva
C) pot ser tant positiva com negativa
D) no es pot calcular per tractar-se de l'estat fonamental

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

3 de juny de 2008

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Els valors propis d'un operador hermític

A) són sempre menors que 1.
B) són sempre positius.
C) poden ser reals o imaginaris.
D) són sempre reals.

2 (1 punt) El valor esperat de l'energia per a un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = N(\phi_{3s}\alpha + \phi_{3s}\beta + \phi_{3p_{+1}}\alpha + \phi_{3p_{-1}}\beta + \phi_{3p_0}\alpha + \phi_{3d_0}\beta + \phi_{3d_{+2}}\alpha + \phi_{3d_{+1}}\beta + \phi_{3d_0}\beta)$ serà:

A) $-\frac{1}{18}E_h$
B) $-\frac{N}{18}E_h$
C) $-\frac{N^2}{18}E_h$
D) $0E_h$

3 (1 punt) Si dos operadors commuten,

A) existeix sempre un conjunt complet de funcions pròpies dels dos operadors.
B) totes les funcions pròpies d'un dels operadors ho són també de l'altre.
C) les funcions pròpies d'un operador són distintes de les de l'altre.
D) els dos operadors són iguals.

4 (1 punt) La correcció a segon ordre de l'energia total del estat fonamental d'un sistema calculada amb el mètode de pertorbacions és

A) sempre positiva.
B) major o igual a l'energia exacta de l'estat fonamental.
C) sempre negativa.
D) menor que l'energia exacta de l'estat fonamental.

5 (1 punt) La degeneració del valor propi d' $\hat{s}^2$ associat al nombre quàntic s és

A) s(s+1)
B) $m_s(m_s+1)$
C) 2s+1
D) $2m_s+1$

6 (1 punt) Per a quin dels estats següents el valor esperat del conmutador $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right]$ és igual a zero?

A) $\psi_{2p_{+1}}$
B) ψ_{2p_0}
C) $\psi_{2p_{-1}}$
D) $\psi_{3d_{+2}}$

7 (1 punt) En un oscil·lador harmònic monodimensional en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi(x) = N\left(\phi_0(x) + 2\phi_1(x) + 3\phi_2(x)\right)$ on $\phi_v(x)$ són funcions pròpies de l'operador hamiltonià, quina és la probabilitat de trobar el valor $\frac{3}{2}h\nu$ en mesurar l'energia?

A) 2/7
B) 1/3
C) 2/3
D) 1/7

8 (1 punt) Si a un oscil·lador harmònic tridimensional amb $k_x = k_y = k_z$ l'hi introduïm una pertorbació $b(\alpha x^4)$ amb b constant i molt petita, la correcció a l'energia de l'estat fonamental fins a primer ordre serà:

A) $\dfrac{15b}{8\alpha}$
B) $\dfrac{3b}{8\alpha}$
C) $0b$
D) $\dfrac{3b}{4\alpha}$

9 (1 punt) L'operador associat a un observable té només dos valors pròpis possibles: $+\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$. Per a un estat per al qual el valor esperat d'aquest observable és 0, quina serà la probabilitat d'obtenir el valor $+\frac{1}{2}$ en fer una mesura?

A) 0
B) $+\dfrac{1}{2}$
C) $-\dfrac{1}{2}$
D) +1

10 (1 punt) Dues funcions, f i g, diferents i degenerades respecte a un operador $\hat{A}$ acompleixen que

A) f i g tenen la mateixa energia
B) $g=-f$
C) $\hat{A}f = \hat{A}g$
D) $f+g$ és pròpia de $\hat{A}$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Departament de Química Física *10 de juny de 2009*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Una partícula en una caixa de potencial tridimensional cúbica es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{2}\left(\varphi_{111} + \varphi_{121} + \varphi_{211} + \varphi_{221}\right)$, on els subíndexs indiquen els nombres quàntics n_x, n_y i n_z. Quina serà la probabilitat que al mesurar l'energia obtinguem el valor del primer nivell excitat?

A) 0
B) 1/4
C) 1/2
D) 1

2 (1 punt) Quines unitats (S.I.) té la funció d'ona que descriu un sistema de 3 partícules sense spin?

A) no té unitats
B) m^{-3}
C) $m^{-3/2}$
D) $m^{-9/2}$

3 (1 punt) Quina d'aquestes funcions no és adequada per obtenir una solució aproximada de la partícula en una caixa unidimensional, $x \in [0,a]$, amb el mètode variacional?

A) $x^2(a-x)^2$
B) $e^{-(x-a/2)^2}$
C) $\cos(\frac{\pi x}{a} + \frac{\pi}{2})$
D) $\left(e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a}\right)/2i$

4 (1 punt) Quan utilitzem una combinació lineal d'un conjunt de funcions ortonormals per expressar una funció de prova variacional,

A) se'ns simplifiquen els càlculs perquè la matriu de solapament és la identitat.
B) obtenim un resultat erroni perquè no pot ser una funció de prova correcta.
C) obtenim sempre la solució exacta perquè el conjunt forma base de l'espai de funcions.
D) no importa el nombre de funcions ortonormals que usem, només n'hi haurà una que tingui contribució no nul·la en la funció final.

5 (1 punt) Indiqueu la resposta correcta respecte a la funció d'ona d'un sistema.

A) És sempre una funció real de les coordenades de posició de cada partícula.
B) No depèn del temps en els estats no estacionaris.
C) La densitat de probabilitat no depen del seu signe.
D) El seu mòdul al quadrat pot ser un nombre no real.

6 (1 punt) Quin és l'operador commutador entre l'operador $\hat{p}_x$ i l'operador associat al producte $x \cdot y$ d'una partícula en el pla XY:

A) 0
B) $-i\hbar y$
C) $-i\hbar x$
D) $-i\hbar xy$

7 (1 punt) Indiqueu quina és la resposta falsa en relació a una partícula en una caixa unidimensional de potencial:

A) La diferència entre nivells d'energia consecutius depèn linealment d'n.
B) Cada funció d'ona, $\phi_n(x)$, presenta *n-1* nodes.
C) En els estats amb n parell, la densitat de probabilitat de trobar la partícula és màxima en els extrems 0 i a.
D) L'energia de l'estat fonamental no és nul·la.

8 (1 punt) Tenint en compte que el moment magnètic d'spin d'un electró s'expressa com $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} g_e \vec{S}$ on e, m_e i g_e són constants de l'electró i $\vec{S}$ el seu moment angular d'spin, indica quina de les següents relacions de commutació entre operadors associats a aquestes magnituds serà diferent de zero.

A) $\left[\hat{\mu}_z, \hat{S}_y\right]$
B) $\left[\hat{\mu}^2, \hat{S}_z\right]$
C) $\left[\hat{\mu}^2, \hat{S}^2\right]$
D) $\left[\hat{\mu}_z, \hat{S}_z\right]$

9 (1 punt) Tenint en compte que $\Phi_v(x)$ són les funcions pròpies del hamiltonià d'un oscil·lador harmònic monodimensional, indiqueu quin dels següents estats d'un oscil·lador harmònic bidimensional de constants $k_x = k_y$ pot tenir un valor esperat de la coordenada x diferent de zero.

A) $\Phi_0(x)\Phi_0(y)$
B) $\Phi_1(x)\Phi_1(y)$
C) $\Phi_0(x)\Phi_0(y) + \Phi_1(x)\Phi_0(y)$
D) $\Phi_0(x)\Phi_0(y) + \Phi_1(x)\Phi_1(y)$

10 (1 punt) Quina és la probabilitat de que en mesurar la component z del moment angular d'un àtom d'hidrogen en l'estat descrit per la funció $\psi = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}\right)$ s'obtingui com a resultat el valor $\hbar$?

A) 1/6
B) 2/3
C) 5/6
D) 5/12

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

14 de juny de 2010

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Indiqueu l'afirmació correcta per a una partícula aïllada en un estat no estacionari $\psi(\vec{r};t)$:

A) $|\psi(\vec{r};t)|^2$ no depèn del temps.
B) la probabilitat que en mesurar l'energia obtinguem un determinat valor no depèn del temps.
C) el valor esperat del hamiltonià depèn del temps.
D) la incertesa en l'energia depèn del temps.

2 (1 punt) Si dos operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ commuten

A) qualsevol funció pròpia d' $\hat{A}$ també ho serà de $\hat{B}$.
B) una funció pròpia degenerada d' $\hat{A}$ també serà degenerada de $\hat{B}$.
C) existeix un conjunt de funcions que són pròpies dels dos operadors.
D) no pot existir cap funció pròpia dels dos operadors alhora.

3 (1 punt) En el mètode variacional lineal, les funcions que es combinen linealment

A) han de ser linealment dependents.
B) han d'estar normalitzades.
C) han de ser ortonormals.
D) han de complir les condicions de contorn del sistema.

4 (1 punt) La condició de normalització per a la funció d'ona $\psi_{1s}\alpha$ d'un àtom d'hidrogen és

A) $\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{1s}|^2 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\varphi = 1$
B) $\int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty |\psi_{1s}|^2 dxdydz = 1$
C) $\sum_{\omega=-1/2}^{1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{1s}|^2 |\alpha|^2 dr d\theta d\varphi = 1$
D) $\sum_{\omega=-1/2}^{1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{1s}|^2 |\alpha|^2 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\varphi = 1$

5 (1 punt) Per a una funció $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3$ on φ_1, φ_2 i φ_3 són funcions qualssevol de quadrat integrable, la condició de normalització es pot expressar com a $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$

A) si les funcions φ_1, φ_2 i φ_3 están normalitzades.
B) si les funcions φ_1, φ_2 i φ_3 són ortogonals entre si.
C) si les funcions φ_1, φ_2 i φ_3 están normalitzades i són ortogonals entre si.
D) sempre.

6 (1 punt) El valor esperat de l'energia per l'ió He^+ en l'estat $\psi = N(\psi_{3d_{+2}}\alpha + \psi_{4d_{+2}}\beta)$ és

A) $-\frac{2}{9}\ ha$
B) $-\frac{1}{8}\ ha$
C) $-\frac{25}{144}\ ha$
D) $-\frac{17}{288}\ ha$

7 (1 punt) En multiplicar un operador per una constant real *b* els valors propis del nou operador

A) són els mateixos que els de l'operador original.
B) són els resultants de sumar *b* als valors propis de l'operador original.
C) són els resultants de multiplicar per *b* els valors propis de l'operador original.
D) són els resultants de dividir per *b* els valors propis de l'operador original.

8 (1 punt) Els valors què es poden obtenir per mesura d'S^2 en el cas d'un electró són, en u.a.,

A) $\pm\frac{1}{2}$
B) $\pm\frac{3}{2}$
C) $\frac{3}{4}$
D) 1

9 (1 punt) Quina de les següents afirmacions sobre un oscil·lador harmònic unidimensional és falsa?

A) No és possible que l'oscil·lador es trobi a una zona clàssicament prohibida (T< 0).
B) La densitat de probabilitat al centre de l'eix de les x (x=0) és nul·la en els nivells senars (n=1,3,5,...).
C) L'energia del seu estat fonamental és diferent de zero.
D) La diferència entre dos nivells d'energia consecutius és constant.

10 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents als mètodes variacional i pertorbacional, és certa:

A) El mètode pertorbacional proporciona sempre aproximacions a l'energia total iguals o superiors a l'exacta.
B) Per aplicar el métode pertorbacional cal conèixer les funcions pròpies del hamiltonià no pertorbat.
C) El mètode variacional permet calcular correccions d'ordres 1, 2, etc. a l'energia dels estats estacionaris.
D) L'energia aproximada calculada amb el mètode variacional és suma dels valors propis del hamiltonià.

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

7 de juny de 2011

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Una partícula en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites i d'extrems *0* i *a* es troba en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada $\Psi(x)=\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. La probabilitat de que, en mesurar l'energia, obtinguem el valor $\frac{h^2}{8ma^2}$ és

A) 1,0000
B) 0,6266
C) 0,6074
D) 0,3926

2 (1 punt) Si ψ és una funció que descriu l'estat d'un sistema, es compleix que $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$

A) sempre.
B) mai.
C) només si ψ és un estat estacionari.
D) només si ψ és un estat no estacionari.

3 (1 punt) El valor esperat de l'energia d'un oscil·lador harmònic monodimensional que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = N(i\phi_1 + 2\phi_2)$, amb ϕ_1 i ϕ_2 funcions pròpies de l'hamiltonià i N la constant de normalització, és:

A) $\frac{18}{10}h\nu$
B) $\frac{23}{10}h\nu$
C) $\frac{23}{2}h\nu$
D) $2h\nu$

4 (1 punt) Quina de les següents funcions d'ona que descriuen l'estat d'un àtom d'hidrogen és compatible amb el fet de que en mesurar L_z un nombre infinit de vegades obtinguem la meitat de les vegades $+\hbar$ i l'altre meitat $-\hbar$?

A) $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{1s} + \phi_{2p_{+1}} + 2\phi_{2p_{-1}}\right)$
B) $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{2s} + \phi_{2p_x} + \phi_{2p_y}\right)$
C) $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_x} + \phi_{2p_y}\right)$
D) $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2d_0} + \phi_{2d_{xy}}\right)$

5 (1 punt) Si $\hat{A}$ és un operador amb només 3 valors propis, +2, 0 i -2, indiqueu quina de les següents afirmacions és certa si es fan moltes mesures d'*A*:

A) Pot ser que en algún estat només s'obtingui el valor 0.
B) Per a qualsevol estat s'obtindran tots 3 valors.
C) La probabilitat d'obtenir els valors +2 i -2 sempre serà la mateixa en qualsevol estat.
D) El valor esperat serà 0 en qualsevol estat.

6 (1 punt) Si es té una partícula en una dimensió amb una energia potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + c$ amb k i c constants, indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) Les funcions pròpies de l'hamiltonià són com les de l'oscil·lador harmònic però amb un altre valor d'α.
B) Les funcions pròpies de l'hamiltonià són les mateixes que les de l'oscil·lador harmònic.
C) Els valors propis de l'hamiltonià són els mateixos que els de l'oscil·lador harmònic.
D) Els valors propis de l'hamiltonià són els de l'oscillador harmònic multiplicats per *c*.

7 (1 punt) Si *E* és un valor popi d' $\hat{H}$ doblement degenerat i ψ_1 i ψ_2 són funcions linealment independents tals que $\hat{H}\psi_1 = E\psi_1$ i $\hat{H}\psi_2 = E\psi_2$, quina de les següents afirmacions és falsa ?

A) ψ_1 i ψ_2 no són la única parella de funcions que són pròpies d' $\hat{H}$ amb valor propi *E*.
B) Qualsevol combinació lineal de ψ_1 i ψ_2 serà pròpia d' $\hat{H}$ amb valor propi *E*.
C) $\hat{H}\psi_1 = \hat{H}\psi_2$.
D) $\hat{H}(\psi_1 - \psi_2) = E(\psi_1 - \psi_2)$.

8 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions referides a una partícula en una caixa és certa:

A) No es considera *n=0* perquè sinó l'energia del sistema seria *0*.
B) No es considera *n=0* perquè sinó la funció s'anul·la en tots els punts.
C) No hi ha una energia mínima com passa en el cas de l'oscil·lador harmònic.
D) El nombre de nodes de cada una de les funcions ψ_n dels estats estacionaris és *n*.

9 (1 punt) Si s'aplica la teoria de pertorbacions:

A) L'hamiltonià del sistema ha de ser forçosament separable.
B) Cal conèixer els valors propis de l'hamiltonià sense pertorbar però no cal coneixer les seves funcions pròpies.
C) La correcció de primer ordre dels nivells d'energia pot ser zero.
D) El valor aproximat de l'energia de l'estat fonamental sempre serà superior o igual a l'exacte.

10 (1 punt) En el mètode variacional lineal:

A) Es busquen les millors funcions de la combinació lineal que es multipliquen pels coeficients.
B) Les funcions que es combinen han d'estar normalitzades.
C) Per a calcular la matriu ***H*** no cal emprar les funcions que es combinen.
D) Per a calcular la matriu ***S*** no cal emprar l'hamiltonià del sistema.

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *5 de juny de 2012*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Quina de les següents funcions de x, y i z és pròpia de l'operador $\hat{L}_z$

A) $\phi(x,y,z) = x^2 + y^2$
B) $\phi(x,y,z) = e^{xy}$
C) $\phi(x,y,z) = x^2 - y^2$
D) $\phi(x,y,z) = xy$

2 (1 punt) L'estat d'una partícula lliure en l'instant *t=0* ve descrit per la funció d'ona normalitzada $\psi(x;0) = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/4} e^{-3x^2}$. La incertesa en la posició en unitats atòmiques serà

A) 0
B) $\frac{1}{72}$
C) $\frac{1}{6\sqrt{2}}$
D) $\frac{1}{\sqrt{12}}$

3 (1 punt) La funció que descriu l'estat d'una partícula de massa m en una caixa de potencial unidimensional entre *0* i a és $\psi(x) = N\sum_{n=1}^{5} n \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$, on N és la constant de normalització. La probabilitat que en mesurar l'energia obtinguem el valor $\frac{h^2}{2ma^2}$ és

A) 0
B) $\frac{1}{5}$
C) $\frac{4}{55}$
D) 1

4 (1 punt) La funció d'ona $\phi_{4d_{xy}} \cdot \alpha$ que descriu l'estat d'un àtom d'hidrogen és funció pròpia dels operadors

A) $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$
B) $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{S}^2$
C) $\hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$
D) $\hat{H}, \hat{L}_z, \hat{S}^2$

5 (1 punt) La partícula en una caixa de potencial unidimensional de parets infinites entre *0* i *a* té, per a un determinat estat, com a màxim una incertesa en la posició igual a *a*. El mínim valor per a la incertesa del moment lineal serà

A) $\frac{1}{2a}\hbar$
B) $\frac{1}{2}\hbar$
C) 0
D) $\frac{1}{2}i\hbar$

6 (1 punt) Quin és l'operador associat a l'observable velocitat al cub (v^3) per a una partícula de massa m que es mou en una dimensió?

A) $\frac{d^3}{dx^3}$
B) $-i\hbar^3\frac{d^3}{dx^3}$
C) $-\frac{i\hbar^3}{m^3}\frac{d^3}{dx^3}$
D) $\frac{\hbar^3}{m^3}\left(\frac{d}{dx}\right)^3$

7 (1 punt) Quina és la probabilitat que en mesurar L_z en un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat electrònic excitat $\phi_{3d_{x^2-y^2}}\cdot\alpha$ obtinguem el valor $+\hbar$?

A) 0
B) 0,25
C) 0,5
D) 1

8 (1 punt) Quines són les posicions al voltant de les quals és menys probable trobar una partícula en una caixa de potencial unidimensional entre *0* i *a* en l'estat propi ϕ_n amb n=3?

A) 0, a/2, a
B) a/3, 2a/3
C) 0, a/3, 2a/3, a
D) 0, a

9 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions relatives a un oscil·lador harmònic és falsa:

A) La diferència d'energia entre dos nivells d'energia consecutius sempre és la mateixa.
B) Si la constant de força s'augmenta, també ho fa la separació energètica entre dos nivells consecutius.
C) Quan el nombre quàntic n augmenta, augmenta la densitat de probabilitat de trobar la partícula en el punt x=0.
D) El valor esperat de x per a l'estat propi amb n=0 és igual al valor per a l'estat amb n=4.

10 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) El mètode variacional lineal permet obtenir estimacions a les energies d'estats excitats.
B) Al mètode variacional lineal no cal que les funcions de base siguin ortonormals.
C) Si en el mètode variacional lineal fem servir una base ortonormal es simplifiquen els càlculs.
D) El resultat obtingut amb el mètode variacional lineal depèn només del nombre de funcions de base i no de quin tipus de funcions de base es tracti.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *5 de juny de 2013*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Siguin φ_1 i φ_2 dues funcions normalitzades i pròpies d'un operador hermític $\hat{A}$ amb valors propis a_1 i a_2 de manera que $a_2 \neq a_1$. Indiqueu quina de les següents relacions és falsa:

A) $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle$
B) $\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle$
C) $\langle \hat{A}\varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \hat{A}\varphi_2 | \varphi_2 \rangle$
D) $\langle \hat{A}\varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | \hat{A}\varphi_2 \rangle$

2 (1 punt) Se sap que una partícula de massa m està en una caixa de potencial unidimensional d'amplada a i que es troba en un estat estacionari $\phi_n(x)$ tal que per a passar a l'estat estacionari n+1 cal un 21% de la seva energia. Quina és l'energia de l'estat en el que es troba ?

A) $\dfrac{8h^2}{ma^2}$
B) $\dfrac{9h^2}{ma^2}$
C) $\dfrac{25h^2}{2ma^2}$
D) $\dfrac{81h^2}{8ma^2}$

3 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions relatives als mètodes variacional i pertorbacional és falsa:

A) L'energia variacional sempre és major o igual a l'energia exacta de l'estat fonamental del sistema.
B) L'aproximació a l'energia obtinguda amb una funció variacional lineal depèn del nombre de funcions de base emprades.
C) Els mètodes variacional i pertorbacional permeten també estudiar estats excitats.
D) L'energia obtinguda mitjançant el mètode pertorbacional per l'estat fonamental és sempre més gran o igual que l'exacta.

4 (1 punt) El valor esperat de l'energia per a un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció $\psi = N\left(\phi_{2s}\alpha + \phi_{2p_{+1}}\beta + \phi_{2p_0}\alpha + \phi_{2p_{-1}}\beta\right)$ és en u.a. :

A) 0
B) -1/8
C) -N/8
D) -N^2/8

5 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions relatives a la funció d'ona és falsa:

A) Ha de ser de quadrat integrable.
B) Ha de donar sempre valors reals.
C) Depèn de les coordenades de posició i d'spin de cada partícula del sistema.
D) Les seves variables són sempre reals.

6 (1 punt) Quina de les afirmacions següents relatives a un oscil·lador harmònic unidimensional és falsa ?

A) L'energia de tots els seus estats estacionaris és positiva.
B) La diferència d'energia entre qualsevol parella d'estats estacionaris és la mateixa.
C) L'energia del seu estat fonamental és no nul·la.
D) Tots els nivells d'energia són no degenerats.

7 (1 punt) Si apliquem el mètode variacional lineal al cas d'una partícula en una caixa monodimensional emprant la funció de prova $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$ on φ_1 i φ_2 són les funcions pròpies de la partícula en una caixa monodimensional, els valors que obtindrem dels coeficients c_1 i c_2 per a l'energia de l'estat fonamental seran respectivament

A) 0 i 1
B) $\frac{1}{\sqrt{2}}$ i $-\frac{1}{\sqrt{2}}$
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}$ i $\frac{1}{\sqrt{2}}$
D) 1 i 0

8 (1 punt) Si estudiem una partícula en una sola dimensió amb un potencial V(x), la zona clàssicament permesa serà aquella per la qual en mecànica clàssica

A) l'energia potencial és més petita que la cinètica.
B) l'energia potencial és més gran que la cinètica.
C) l'energia potencial és més petita que la total.
D) l'energia potencial és més gran que la total.

9 (1 punt) Els valors propis d'un operador associat a un observable B són tres: +1, 0 i -1. Indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) En alguna mesura de B es pot obtenir el valor 0.
B) Per a qualsevol estat el valor esperat de B serà 0.
C) Hi ha algun estat per al qual el valor esperat de B pot ser 1/2.
D) Hi ha algun estat per al qual el valor esperat de B pot ser -1.

10 (1 punt) Si la funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema en un instant donat és $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$ on ϕ_1 i ϕ_2 són funcions normalitzades pròpies d'$\hat{A}$ de valors propis diferents a_1 i a_2, respectivament, i es fa una mesura d'A la funció immediatament després de la mesura serà:

A) $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$
B) $\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1$ o bé $\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2$
C) $\frac{1}{2}\phi_1$ o bé $\frac{1}{2}\phi_2$
D) ϕ_1 o bé ϕ_2

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III

(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *2 de juny de 2014*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) En un sistema amb un hamiltonià independent del temps, si un observable A té un operador també independent del temps que commuta amb el hamiltonià (indiqueu l'afirmació *falsa*):

A) Existeix un conjunt complet de funcions pròpies d' $\hat{A}$ i d' $\hat{H}$.
B) Els observables A i H són compatibles.
C) El valor esperat $\langle A \rangle$ és independent del temps en tots els estats del sistema.
D) El valor esperat $\langle A \rangle$ depèn del temps en els estats no estacionaris del sistema.

2 (1 punt) Quant val la incertesa en el valor de l'energia per a l'ió Li^{2+} en l'estat $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s} + \phi_{2p_z}\right)$?

A) 3,370 u.a.
B) 0,000 u.a.
C) 1,685 u.a.
D) 3,000 u.a.

3 (1 punt) Quins són els valors menys probables de x per a una partícula en una caixa de potencial unidimensional de longitud a en l'estat n=3?

A) $0, \frac{a}{2}, a$
B) $\frac{a}{3}, \frac{2a}{3}$
C) $0, \frac{a}{3}, \frac{2a}{3}, a$
D) $0, \frac{a}{4}, \frac{a}{2}, \frac{3a}{4}, a$

4 (1 punt) Quina de les següents funcions *no* pot descriure un estat de l'àtom d'hidrogen (b, c i d són constants):

A) $\phi(r,\theta,\varphi) = N \cdot e^{-\frac{Zr}{c}}$

B) $\phi(r,\theta,\varphi) = N \cdot \cos(b \cdot \theta) \cdot e^{-\frac{Zr}{c}}$

C) $\phi(r,\theta,\varphi) = N \cdot r^2 \sin(b \cdot \theta)$

D) $\phi(r,\theta,\varphi) = N \cdot e^{-\frac{Zr}{c}} \cdot \sin(b \cdot \theta) \cdot \cos(d \cdot \theta)$

5 (1 punt) Un oscil·lador harmònic bidimensional de massa m té constants de força $k_x = 4k_y$. L'energia i degeneració (entre claudàtors) dels quatre primers nivells és

A) $\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [1], $2\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [2], $3\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [3], $4\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [4].

B) $\frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [1], $\frac{5}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [2], $\frac{7}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [3], $\frac{9}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [4].

C) $\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [1], $2\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [1], $3\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [2], $4\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [2].

D) $\frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [1], $\frac{5}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [1], $\frac{7}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [2], $\frac{9}{2}\hbar\sqrt{\frac{k_y}{m}}$ [2].

6 (1 punt) Un oscil·lador harmònic unidimensional de massa m i constant de força k es troba en l'estat quàntic n=0. Si l'oscil·lador es comportés clàssicament, per a quin valor de la seva posició, x, s'anul·laria la seva energia cinètica?

A) $\pm\frac{\hbar}{\sqrt{km}}$

B) $\pm\left(\frac{\hbar}{\sqrt{km}}\right)^{1/2}$

C) $\pm\frac{h}{\sqrt{km}}$

D) 0

7 (1 punt) En un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\Phi=\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{2s}+\frac{1}{2}\phi_{2p_x}+\frac{1}{2}\phi_{2p_z}$ mesurem L_z i obtenim el valor $\hbar$. Quina serà la funció d'ona de l'àtom just després de fer aquesta mesura?

A) ϕ_{2s}
B) ϕ_{2p_x}
C) ϕ_{2p_z}
D) ϕ_{2p_1}

8 (1 punt) El hamiltonià d'un àtom d'hidrogen sotmès a un camp elèctric constant d'intensitat F u.a. dirigit segons la direcció de l'eix z és $\hat{H}=\hat{H}^0+zF$, on $\hat{H}^0$ és el hamiltonià de l'àtom aïllat. En utilitzar el mètode variacional amb una funció de prova del tipus $c_1\phi_{1s}+c_2\phi_{2p_z}$ per aproximar l'energia i la funció d'ona de l'estat fonamental del sistema es calcula, entre d'altres, la integral $\left\langle\phi_{2p_z}\middle|\hat{H}\phi_{2p_z}\right\rangle$. El valor d'aquesta en u.a. és

A) $-\frac{1}{8}$

B) $\frac{2^{15/2}}{3^5}F$

C) $-\frac{1}{2}$

D) $-\frac{1}{2}+\frac{2^{15/2}}{3^5}F$

9 (1 punt) L'energia potencial que manté lligats el protó i el neutró d'un nucli de deuteri (^{2}H) es pot aproximar mitjançant l'expressió $V(r)$ = (-c/r) exp(–dr), on c i d són constants i r és la distància entre les dues partícules. Indiqueu quina de las afirmacions següents és *falsa* pel que fa al moviment relatiu de les dues partícules (r, θ i φ són les coordenades polars esfèriques del neutró relatives al protó):

A) Les funcions d'ona dels estacionaris es poden escriure com a productes d'una funció d'r per una funció de θ i φ.
B) L'operador $\hat{L}^2$ commuta amb el hamiltonià.
C) Les energies dels estats estacionaris es poden obtenir resolent una equació diferencial que no depèn de les variables θ i φ.
D) La densitat de probabilitat de tots els estats estacionaris és independent de les variables θ i φ.

10 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és *certa*:

A) Per obtenir el valor d'un observable A en un estat qualsevol descrit per una funció d'ona Ψ s'ha d'aplicar l'operador $\hat{A}$ a la funció Ψ per determinar el valor propi corresponent.
B) Una mesura modifica sempre l'estat d'un sistema quàntic.
C) La degeneració d'un nivell d'energia d'un sistema pot disminuir quan s'afegeix un terme addicional al hamiltonià.
D) Si dos observables són compatibles la incertesa d'ambdós és zero en qualsevol estat.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *12 de juny de 2015*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió).

1 (1 punt) Calculeu la indeterminació de la distància electró-nucli (r) en unitats atòmiques per a un àtom d'hidrogen en l'estat 1s.

A) 0,866
B) 0,399
C) 0,366
D) 0,271

2 (1 punt) Indiqueu quina de les funcions d'ona següents *no* descriu un estat d'un oscil·lador harmònic bidimensional simètric (k_y=k_x) amb energia $3h\nu$ (ϕ_n representa un estat estacionari d'un oscil·lador unidimensional):

A) $\phi_1(x)\,\phi_1(y)$
B) $1/\sqrt{2}\left(\phi_2(x)\,\phi_0(y)+\phi_1(x)\,\phi_1(y)\right)$
C) $\phi_1(x)\,\phi_2(y)$
D) $\phi_0(x)\,\phi_2(y)$

3 (1 punt) Un oscil·lador harmònic unidimensional es troba, en l'instant t = 0, en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi(x;0)=\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_0(x)+\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(x)$, on $\phi_0(x)$ i $\phi_1(x)$ representen l'estat fonamental i el primer estat excitat. La funció d'ona en l'instant $t=\frac{1}{2\nu}$ serà:

A) $\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_0(x)+\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_1(x)$
B) $-\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_0(x)+\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_1(x)$
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_0(x)-\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_1(x)$
D) $-\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_0(x)-\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_1(x)$

4 (1 punt) Indiqueu quin del següents operadors, que operen sobre funcions d'una variable x, *no* és lineal:

A) $\hat{A}\psi(x)=e^{-\psi(x)}$
B) $\hat{A}\psi(x)=\frac{d\psi(x)}{dx}$
C) $\hat{A}\psi(x)=e^{-x^2}\psi(x)$
D) $\hat{A}\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}e^{ixy}\psi(y)dy$

5 (1 punt) Tenint en compte que ϕ_n (amb $n = 0, 1, \ldots$) són les funcions pròpies del hamiltonià d'un oscil·lador harmònic unidimensional, indiqueu en quin dels estats següents s'anul·larà el valor esperat de la coordenada de posició de l'oscil·lador:

A) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 + \phi_1)$
B) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 + \phi_2)$
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2 + \phi_3)$
D) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 - \phi_1)$

6 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és *certa* per a un oscil·lador harmònic bidimensional amb $k_y \neq k_x$:

A) El nivell fonamental és degenerat.
B) Tots els nivells amb els dos nombres quàntics iguals són degenerats.
C) No hi pot haver cap nivell d'energia degenerat.
D) Pot ser que hi hagi algun nivell d'energia degenerat.

7 (1 punt)? La regió clàssicament permesa per a l'electró d'un ió Li^{2+} (Z=3) en el seu estat fonamental és una esfera centrada al nucli de radi (en unitats atòmiques):
A) 1/3
B) 2/3
C) 1
D) 4/3

8 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és *certa* en relació a un observable A l'operador del qual té 4 valors propis que són –2, –1, 1 i 2.

A) El valor esperat d'A és 0 en qualsevol estat.
B) La probabilitat d'obtenir els valors –2 i 2 en mesurar A és la mateixa en qualsevol estat.
C) Hi ha estats en els quals es pot obtenir el valor 0 en mesurar A.
D) Hi ha estats en els quals *només* es poden obtenir els valors 1 i 2 en mesurar A.

9 (1 punt) La degeneració del segon nivell excitat d'una partícula dins d'una caixa de potencial bidimensional quadrada de costat a és:

A) 1
B) 2
C) 3
D) 4

10 (1 punt) Per a un mateix sistema es fan dos càlculs de tipus variacional lineal, el primer amb un conjunt d'm funcions de base i per al segon prescindim d'una d'aquestes. Indiqueu quina d'aquestes afirmacions és *falsa*:

A) La dimensió de la matriu **S** serà més gran en el primer càlcul que en el segon.
B) La dimensió de la matriu **H** serà més gran en el primer càlcul que en el segon.
C) L'energia aproximada de l'estat fonamental obtinguda en el primer càlcul serà més gran que la obtinguda en el segon.
D) El nombre d'estats per als quals s'obté una energia aproximada és més gran en el primer càlcul que en el segon.

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) **12 de novembre de 2003**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.
Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).
La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.
Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*en majúscules*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1.(1 punt) Si combinem dues funcions pròpies degenerades d'un operador hermític $\hat{A}$ obtenim una nova funció (indiqueu l'opció correcta)
A) linealment independent de les funcions combinades.
B) amb el mateix valor propi que les funcions combinades.
C) ortogonal a les funcions combinades.
D) que no és pròpia de $\hat{A}$.

2.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és certa:
A) A cada observable li correspon un operador quàntic hermític només si l'observable té anàleg clàssic.
B) Quan es fa una mesura d'un observable els únics valors que es poden obtenir són els de l'espectre de $\hat{H}$.
C) Els estats estacionaris són els que tenen funcions d'ona pròpies d'un operador $\hat{A}$ diferent de $\hat{H}$.
D) La funció d'ona que descriu el sistema just després de mesurar un observable ha d'estar normalitzada.

3.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, relatives al mètode variacional, és certa:
A) El valor de la integral variacional no pot ser igual al valor exacte de l'energia de l'estat fonamental.
B) La integral variacional ve donada per $\langle\Psi|\hat{H}'\ \Psi\rangle$ on $\hat{H}'$ compleix $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$.
C) Només proporciona aproximacions a l'energia de l'estat fonamental si aquest és no degenerat.
D) La funció de prova pot ser combinació lineal de funcions linealment independents.

4.(1 punt) Un àtom d'hidrògen està en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada:
$\psi = (1/\sqrt{3}) \times (\phi_{1s} + \phi_{2p_x} + \phi_{3p_x})$
Si en mesurar $\hat{L}_z$ obtenim el valor $-\hbar$, l'estat del sistema just després de la mesura serà
A) ϕ_{2p_x}
B) $\phi_{2p_{-1}}$
C) $(1/\sqrt{2})\ (\phi_{2p_{-1}} + \phi_{3p_{-1}})$
D) $\phi_{3p_{-1}}$

5.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions seguents, relatives a la indeterminació d'un observable A en l'estat quàntic descrit per la funció d'ona Ψ, és certa:
A) Representa un promig dels valors que s'obtindran si es mesura A en un gran nombre de sistemes idéntics descrits per la mateixa funció d'ona Ψ.
B) Només pot ser nul·la si Ψ és pròpia de l'operador $\hat{A}$.
C) S'anul·la si $\hat{A}$ commuta amb el hamiltonià del sistema.
D) És sempre $\geq \hbar/2$.

6.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents relatives als orbitals hidrogenoids ϕ_{nlm} és certa:
A) Són funcions pròpies de $\hat{L}^2$ i de $\hat{L}_z$.
B) Són funcions pròpies de $\hat{L}^2$ amb valor propi $l^2\hbar^2$.
C) Són funcions pròpies de $\hat{L}_z$ amb valor propi $n\hbar$.
D) Només són funcions reals si $l = 0$.

7.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, relatives al mètode pertorbacional per a nivells no degenerats, és certa:
A) Per calcular la correcció d'ordre 1 a l'energia d'un nivell es necessiten totes les funcions pròpies de $\hat{H}^0$.
B) Per calcular la correcció d'ordre 2 a l'energia del nivell fonamental només es necessita la funció pròpia de $\hat{H}^0$ d'energia més baixa.
C) Només es poden obtenir aproximacions a l'energia de l'estat fonamental.
D) Cap de les anteriors.

8.(1 punt) El conmutador $[\hat{x}, \hat{p}_x{}^2]$ es igual a
A) $i\hbar$
B) $-\hbar^2$
C) $-x\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
D) $2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}$

9.(2 punts) La indeterminació en la posició d'un oscil·lador armònic unidimensional en el seu primer estat excitat és:
A) 0
B) $1/\sqrt{2\alpha}$
C) $1{,}732/\sqrt{2\alpha}$
D) $2/\sqrt{\alpha}$
E) $\sqrt{\alpha/2\hbar}$

Examen de Química Física III (test dels temes 1, 2 i 3) **12 de novembre de 2004**

Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona.

Nom i cognoms: . . . . **Grup:** .

Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió.

Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió (les qüestions en blanc no descompten).

La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

Les respostes a cada qüestió han de traslladar-se a l'encasellat següent (*en majúscules*):

Qüestions:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Respostes de l'alumne:									
Línia reservada per al professor:									

1. (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents a l'orbital hidrogenoide ϕ_{2p_z} d'un àtom d'hidrogen, és certa:

A) És una funció pròpia del hamiltonià amb valor propi –0,125 hartrees.

B) És una funció de las coordenades de posició de l'electró que pren valors <u>no</u> reals.

C) És una funció pròpia d'$\widehat{L^2}$ però no d'$\widehat{L_z}$.

D) El quadrat del seu mòdul pren valors positius per a $z > 0$ i negatius per a $z < 0$.

2. (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents als mètodes variacional i pertorbacional, és certa:

A) El mètode pertorbacional proporciona sempre aproximacions a l'energia total iguals o superiors a l'exacta.

B) L'energia aproximada calculada amb el mètode variacional és suma dels valors propis del hamiltonià.

C) El mètode variacional permet calcular correccions d'ordres 1, 2, etc. a l'energia dels estats estacionaris.

D) Per aplicar el métode pertorbacional cal conèixer les funcions pròpies del hamiltonià no pertorbat.

3. (1 punt) Indiqueu quina de les equacions següents, <u>no</u> representa correctament la condició de normalització d'una funció del tipus $\Psi = \sum_i c_i f_i$, sota les condicions indicades:

A) $\sum_i c_i^2 = 1$, si les funcions f_i estan normalitzades i són ortogonals entre elles i els coeficients c_i són reals.

B) $\sum_i |c_i|^2 = 1$, si les funcions f_i estan normalitzades i són ortogonals entre elles.

C) $\sum_i \sum_j c_i^* c_j = 1$, si les funcions f_i estan normalitzades però <u>no</u> són ortogonals entre elles.

D) $\sum_i |c_i|^2 \langle f_i | f_i \rangle = 1$, si les funcions f_i <u>no</u> estan normalitzades però són ortogonals entre elles.

4. (1 punt) Donada la funció d'ona <u>no</u> normalitzada d'un àtom hidrogenoide $\Psi = \frac{1}{2}\phi_{2p_0} + \frac{1}{3}\phi_{2p_{+1}} + \frac{1}{3}\phi_{2p_{-1}}$ els valors que es poden obtenir en mesurar la component z del moment angular orbital són (indiqueu l'opció correcta):

A) 0, amb una probabilitat igual a 1/2, i $\hbar$ i $-\hbar$ amb probabilitats iguals a 1/3.

B) 0, amb una probabilitat igual a 1/4, i $\hbar$ i $-\hbar$ amb probabilitats iguals a 1/9.

C) 0, amb una probabilitat igual a 9/17, i $\hbar$ i $-\hbar$ amb probabilitats iguals a 4/17.

D) Com que la funció inclou tots els valors possibles d'm per a l=1, podem obtenir qualsevol dels valors 0, $\hbar$ i $-\hbar$ amb les mateixes probabilitats.

5.(1 punt) Si s'aplica el mètode variacional per calcular l'energia de l'estat fonamental de l'He^+ emprant $\psi = Ne^{-r/c}$ com a funció de prova, on c és un paràmetre ajustable i N una constant de normalització, el resultat que s'obtindrà serà (indiqueu l'opció correcta):

A) Cap, perquè no és possible aplicar el mètode variacional a espècies iòniques.

B) Un valor superior a l'energia exacta de l'estat fonamental.

C) Una energia igual a –1/2 hartree

D) Una energia igual a $-\dfrac{2\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}$

6.(1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents és certa:

A) Les funcions pròpies de l'operador $\widehat{L_z}$ són sempre reals.

B) Els valors propis d'un operador hermític són sempre reals.

C) Els valors esperats d'un operador hermític poden no ser reals.

D) La funció que representa l'estat d'un sistema no pot ser imaginària.

7.(1 punt) Un oscil·lador harmònic tridimensional <u>isòtrop</u> en el seu estat fonamental té una energia igual a (indiqueu l'opció correcta):

A) $\dfrac{1}{2}h\nu$

B) $\dfrac{3}{2}h\nu$

C) $\dfrac{1}{2}h\nu_x + \dfrac{1}{2}h\nu_y + \dfrac{1}{2}h\nu_z$ amb $\nu_x \neq \nu_y \neq \nu_z$

D) $\dfrac{3}{2}h(\nu_x + \nu_y + \nu_z)$ amb $\nu_x \neq \nu_y \neq \nu_z$

8.(1,5 punts) Si $\hat{H}$ és el hamiltonià d'una partícula que es mou segons la direcció de l'eix x sotmesa a una energia potencial $V(x)$, el commutador $[\hat{H}, \widehat{p_x}]$ és igual a (indiqueu l'opció correcta):

A) 0

B) $i\hbar\dfrac{dV(x)}{dx}$

C) $-i\hbar\, V(x)\dfrac{d}{dx} + i\hbar\dfrac{dV(x)}{dx}$

D) $\dfrac{i\hbar^3}{2m}\dfrac{d^3}{dx^3} - i\hbar\, V(x)\dfrac{d}{dx}$

E) Cap de les anteriors.

9.(1,5 punts) El valor esperat de l'energia cinètica d'una partícula de massa m en l'estat fonamental d'una caixa de potencial unidimensional d'amplada a és (indiqueu l'opció correcta):

A) 0

B) $\dfrac{\pi\hbar^2}{ma}$

C) $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$

D) $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

4 de novembre de 2005

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Considereu la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}} f_1 + \frac{1}{\sqrt{3}} f_2 + \frac{1}{\sqrt{3}} f_3$ amb f_1 i f_2 funcions pròpies d'un operador $\hat{A}$ de valor propi a_1 i f_3 funció pròpia d'$\hat{A}$ de valor propi a_3 ($a_3 \neq a_1$). Quina de les següents afirmacions és certa?:

A) ψ és pròpia d'$\hat{A}$ de valor propi a_1 amb degeneració 2 i de valor propi a_3 amb degeneració 1.
B) ψ és pròpia d'$\hat{A}$ de valor propi a_1 amb probabilitat 2/3 i de valor propi a_3 amb probabilitat 1/3.
C) ψ és pròpia d'$\hat{A}$ de valor propi $2a_1+a_3$.
D) ψ no és pròpia d'$\hat{A}$.

2 (1 punt) Tenint en compte que, per a una partícula amb el seu moviment restringit a l'eix x, l'operador $\widehat{p_x} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ és hermític, indiqueu quin dels següents operadors no ho és:

A) $\widehat{A} = i\hbar \frac{d}{dx}$
B) $\widehat{B} = \hbar \frac{d}{dx}$
C) $\widehat{C} = i \frac{d}{dx}$
D) $\widehat{D} = -i \frac{d}{dx}$

3 (1 punt) En un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4}}(\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$

fem una mesura del component z del moment angular orbital de l'electró i obtenim com a resultat 0. Quina funció d'ona normalitzada descriu l'estat en que ha quedat l'àtom després de la mesura?

A) $\frac{1}{\sqrt{4}}(\psi_{2s} + \psi_{2p_z})$
B) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s} + \psi_{2p_z})$
C) ψ_{2s}
D) ψ_{2p_z}
E) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2p_x} - \psi_{2p_y})$

4 (1 punt) Indiqueu quina de les afirmacions següents, referents al mètode pertorbacional, és falsa:

A) Condueix a energies aproximades que sempre són superiors o iguals a l'energia no pertorbada
B) Es pot aplicar quan el hamiltonià és semblant a un altre, les funcions i valors propis del qual són conegudes
C) Proporciona successives correccions a les energies de cada estat estacionari del sistema
D) Les energies corregides poden tenir un grau de degeneració menor que les del sistema no pertorbat

5 (1 punt) Una partícula té el seu moviment restringit al semieix x ≥ 0 per un potencial que és zero per a x ≥ 0 i infinit per a x < 0. Indiqueu quins valors podrà prendre la seva energia total:

A) Qualsevol valor real positiu inclòs el zero
B) $\frac{n^2h^2}{8ma^2}$ amb $n = 0, 1, 2, \ldots$
C) $\frac{n^2h^2}{8ma^2}$ amb $n = 1, 2, \ldots$
D) $\frac{n^2h^2}{16ma^2}$ amb $n = 1, 2, \ldots$

6 (1 punt) Si els operadors $\hat{H}$ i $\hat{A}$ commuten entre ells i ψ és una funció pròpia d'$\hat{A}$, digueu quina de les afirmacions següents és certa:

A) L'estat descrit per ψ ha de ser estacionari
B) La dispersió en les mesures d' $\hat{H}$ en l'estat ψ ha de ser 0
C) La funció ψ ha de ser pròpia d' $\hat{H}$
D) La dispersió en les mesures d'$\hat{A}$ en l'estat ψ ha de ser 0

7 (1,5 punts) En un oscil·lador harmònic bidimensional amb $k_y = 4\ k_x$ (indiqueu l'opció correcta):

A) no hi ha estats degenerats perquè el sistema no és tridimensional
B) no hi ha estats degenerats perquè el sistema no presenta simetria
C) els estats amb números quàntics (v_x,v_y): (2,0) i (0,1) estan degenerats
D) els estats amb números quàntics (v_x,v_y): (2,0) i (0,2) estan degenerats

8 (1,5 punts) Per a una partícula amb el seu moviment restringit a l'eix x, el commutador de $\left[\hat{x}^3, \widehat{p_x}\right]$ és igual a

A) 0
B) $i\hbar 3x^2$
C) $-i\hbar x^3 \frac{d}{dx} + 3x^2 i\hbar$
D) $-i\hbar x^3 \frac{d}{dx}$

9 (1 punt) Si prescindim de l'spin, qualsevol estat lligat d'un àtom d'hidrogen es pot expressar, en un instant determinat, en la forma

A) $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$
B) $R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$
C) $\sum_n \sum_l \sum_m \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$
D) $\sum_n \sum_l \sum_m c_{nlm}\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

17 de novembre de 2006

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

1.- (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba a l'estat descrit per la funció $\Psi = N\left(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z} + \Phi_{2p_x}\right)$, on $\Phi_{2s}, \Phi_{2p_z}, \Phi_{2p_x}$ són orbitals hidrogenoides.

A) L'estat és estacionari i la funció Ψ és pròpia d' $\hat{L}^2$ y d' $\hat{L}_z$

B) L'estat és estacionari i la funció Ψ és pròpia d' $\hat{L}^2$ però no ho és d' $\hat{L}_z$

C) L'estat és estacionari i la funció Ψ no és pròpia d' $\hat{L}^2$ ni d' $\hat{L}_z$

D) L'estat no és estacionari

2- (1,5 punts) Si apliquem el mètode variacional per estudiar un sistema monodimensional d'una partícula que té una energia potencial igual a $0.5x^2$ emprant com a funció de prova la funció $\Phi = N\exp(-dx^2)$ obtindrem una aproximació a l'energia:

A) igual a $\dfrac{h^2}{8md^2}$

B) que serà més gran que l'energia de l'oscil·lador harmònic

C) igual a $\dfrac{\hbar^2 d}{m}$

D) que serà més gran que l'energia de l'estat fonamental de l'àtom d'H

3.- (1 punt) Siguin Φ_1 y Φ_2 dues funcions pròpies normalitzades de l'hamiltonià ($\hat{H}\Phi_i = E_i\Phi_i$) d'un sistema amb $E_1 \neq E_2$, a partir de les quals es construeix la funció normalitzada $\Psi = c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2$,

A) la nova funció Ψ també és pròpia de l'hamiltonià amb valor propi igual a $0.5\left(E_1 + E_2\right)$

B) la nova funció Ψ no pot representar cap estat

C) l'estat del sistema descrit per Ψ és un estat estacionari i si mesurem l'energia només podrem obtenir els valors E_1 o E_2

D) el valor esperat de l'energia del sistema en l'estat descrit per la funció Ψ és igual a $|c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2$

4.- (1 punt) Una combinació lineal qualsevol d'N spinorbitals hidrogenoides sempre,

A) és funció pròpia d' $\hat{S}^2$

B) representa un estat estacionari

C) és funció pròpia d' $\hat{S}^2$ i d' $\hat{S}_z$

D) és funció pròpia d' $\hat{L}^2$ i d'una component cartesiana qualsevol del moment angular orbital

5.- (1 punt) En el mètode de pertorbacions l'hamiltonià del sistema s'escriu com $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$, essent $\hat{H}^0$ i $\hat{H}'$, respectivament, l'hamiltonià del sistema sense pertorbar i l'hamiltonià de la pertorbació. Quina de les condicions següents s'ha de complir per a que el mètode sigui aplicable?

A) $\hat{H}^0$ i $\hat{H}'$ han de commutar entre si

B) les funcions pròpies d' $\hat{H}'$ han de ser conegudes

C) $\hat{H}'$ ha de ser molt menor que $\hat{H}^0$

D) els valors propis d' $\hat{H}^0$ i d' $\hat{H}'$ han de ser molt semblants

6.- (1 punt) Tenint en compte les relacions de commutació entre els operadors del moment angular, quin és el m'inim valor possible del producte d'indeterminacions $\Delta L_x \Delta L_y$ per a l'estat Ψ_{2px} de l'àtom d'hidrogen?

A) 0
B) $\dfrac{i\hbar}{2}$
C) $\dfrac{\hbar}{2}$
D) $\hbar$

7.- (1 punt) Una partícula es troba en un estat per al que la funció densitat de probabilitat s'anul·la en el pla *xy* i tendeix a zero a l'infinit. Indiqueu la resposta correcta:

A) a la partícula només la podrem trobar per sota del pla *xy* si inicialment també es trobava per sota d'aquest pla
B) a la partícula només la podrem trobar per damunt del pla *xy* donat que la probabilitat de que pugui creuar el pla és nul·la
C) a la partícula la podrem trobar per sota i per damunt del pla *xy*
D) no pot existir cap estat amb una densitat de probabilitat com l'indicada a l'enunciat

8.- (1 punt) Ens diuen que una partícula dins d'una caixa de potencial monodimensional de parets infinites, $x \in (0,a)$, es troba en un estat descrit per la funció d'ona $\Psi = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \cos\dfrac{\pi x}{a}$; la probabilitat de que en mesurar l'energia trobem el valor corresponent a l'estat $\Phi = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\dfrac{\pi x}{a}$ és,

A) 0.0
B) 0.5
C) 1.0
D) la funció Ψ no pot representar l'estat del nostre sistema

9.- (1,5 punts) Indiqueu quina serà la degeneració de l'energia $\dfrac{3h^2}{16m}$ d'una partícula en una caixa de potencial tridimensional de parets infinites de dimensions a=2, b=2 i c=4

A) 1
B) 2
C) 3
D) 4

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *16 de novembre de 2007*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet.

1.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions sobre l'spin de l'electró és certa

A) La mesura del mòdul al quadrat del moment angular d'spin només pot donar $\frac{1}{2}\hbar^2$

B) La mesura de la component z del moment angular d'spin només pot donar $\frac{1}{2}\hbar$

C) El nombre quàntic d'spin s només pot tenir el valor $\frac{1}{2}$

D) La variable d'spin ω només pot tenir el valor $\frac{1}{2}$

2- (1 punt) Tenim un conjunt d'electrons independents tots ells en el mateix estat i fem una mesura de la seva velocitat en la direcció de l'eix x. Aquestes mesures ens donen un valor mig de 995 km/s i una incertesa en el moment lineal en aquesta direcció del 0,01% del valor mig d'aquest moment lineal. Quina serà la incertesa en la posició?

A) $5{,}817 \cdot 10^{-7}$ m
B) menor o igual a $5{,}817 \cdot 10^{-7}$ m
C) major o igual a $5{,}817 \cdot 10^{-7}$ m
D) $5{,}817 \cdot 10^{+7}$ m

3.- (1 punt) Quina de les següents afirmacions sobre un oscil·lador harmònic unidimensional és falsa?

A) L'energia del seu estat fonamental és diferent de zero
B) No és possible que l'oscil·lador es trobi a una zona clàssicament prohibida (T< 0)
C) La diferència entre dos nivells d'energia consecutius és constant
D) La densitat de probabilitat al centre de l'eix de les x (x=0) és nul·la en els nivells senars (n=1,3,5,...)

4.- (1 punt) Si $\hat{L}^2$ és l'operador moment angular al quadrat i $\hat{L}_i$ (i=x,y,z) una de les seves components, quina de les següents parelles de relacions de commutació es compleixen?

A) $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = 0$; $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$

B) $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$; $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_z\right] = 0$

C) $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$; $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_z$

D) $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = 0$; $\left[\hat{L}_y, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}^2$

5.- (1 punt) La funció d'ona $\psi = N\left(\phi_{2p_x} + \phi_{2p_y} + \phi_{3p_z}\right)$ representa per a l'electró d'un àtom d'hidrogen

A) un estat estacionari
B) una funció pròpia d' $\hat{L}^2$ i d' $\hat{L}_z$
C) una funció pròpia del hamiltonià
D) una funció pròpia d' $\hat{L}^2$

6.- (1 punt) Quan s'aplica el mètode variacional a l'He^+ emprant com a función de prova $\psi = Ne^{-br}$ s'obté:

A) un resultat erroni ja que el mètode variacional no s'aplica a l'estudi dels ions
B) un paràmetre variacional $b = \frac{1}{a_0}$
C) un paràmetre variacional $b = \frac{2}{a_0}$
D) un valor superior a l'energia exacta de l'estat fonamental de l'ió He^+

7.- (1 punt) Per a un oscil·lador harmònic bidimensional amb $k_x = k_y$

A) el valor propi de l'energia de l'estat fonamental és doblement degenerat
B) el valor propi de l'energia del primer estat excitat és doblement degenerat
C) el valor propi de l'energia del primer estat excitat és triplement degenerat
D) no hi pot haver degeneració, ja que no es tracta d'un sistema tridimensional

8.- (1 punt) La correcció de primer ordre a l'energia aplicant la teoria de pertorbacions en el cas d'un nivell d'energia no degenerat es pot calcular coneixent només

A) l'energia del nivell del sistema no pertorbat
B) l'energia del nivell i la funció pròpia corresponent del sistema no pertorbat
C) el hamiltonià de la pertorbació i la funció propia del sistema no pertorbat
D) la funció pròpia del sistema no pertorbat i l'energia del nivell del sistema pertorbat

9.- (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions relatives als mètodes variacional o pertorbacional és certa:

A) Amb el mètode variacional és impossible fer una estimació de l'energia d'un estat que no sigui el fonamental
B) amb el mètode pertorbacional fins a ordre 1 la funció aproximada a la que descriu l'estat del sistema ($\psi_n \simeq \psi_n^0 + \psi_n^1$) no està normalitzada
C) amb el mètode variacional mai no es pot arribar a obtenir l'energia exacta de l'estat fonamental
D) amb el mètode pertorbacional obtenim sempre una energia superior al valor exacte de l'energia corresponent a l'estat que ens interessa

10.- (1 punt) Per a una partícula en una caixa de potencial bidimensional, el producte de la incertesa en la posició segons l'eix x per la incertesa en la posició en l'eix y ha de ser

A) sempre zero
B) sempre menor que zero
C) major o igual a $\frac{\hbar}{2}$
D) major o igual a zero depenent de l'estat de la partícula

UNIVERSITAT DE BARCELONA

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

14 de novembre de 2008

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Digueu quina de les següents afirmacions relatives al mètode variacional és falsa:
- A) la funció de prova variacional ha de dependre com a mínim d'un paràmetre variacional.
- B) la funció de prova variacional ha de ser necessàriament derivable.
- C) la funció de prova variacional ha de complir les mateixes condicions de contorn que la solució exacta.
- D) la funció de prova variacional ha de ser normalitzable.

2 (1 punt) De quantes coordenades depèn la funció d'ona que descriu l'estat d'un sistema tridimensional format per tres partícules d'spin 1/2 i tres d'spin 0?
- A) 12
- B) 18
- C) 21
- D) 24

3 (1 punt) Un àtom d'hidrogen està, en l'instant t=0s, en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{2p_x} + \phi_{3p_x})$.

Si en aquest instant mesurem $\hat{L}_z$ i obtenim el valor $+1\hbar$, digueu quina és la probabilitat d'obtenir en l'instant t=100s el valor $-\frac{1}{8}hartree$ per a l'energia.
- A) 0
- B) 1/4
- C) 1/2
- D) 1

4 (1 punt) Si l'energia potencial d'una partícula en una dimensió ve donada per $V(x) = 0.5kx^2 + cx^4 + dx^5$, on c, d i k són constants de manera que c i d són molt petites en comparació amb k, la correcció de primer ordre a l'energia de l'estat fonamental depèn de:
- A) *k, c* i *d*
- B) *k* i *c*
- *C) c*
- D) *d*

5 (1 punt) Si mesurem l'energia d'un electró en una caixa de potencial monodimensional de parets infinites i d'amplada $0{,}529177 \cdot 10^{-10}\,m$ quan es troba en un estat descrit per la funció d'ona $\Psi = \sqrt{\frac{1}{5}}\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\frac{3\pi x}{a}$, podrem obtenir valors de l'energia iguals a:
- A) $\frac{\pi^2}{2}$ i $\frac{3\pi^2}{2}$ *hartree* amb probabilitats, respectivament iguals a $\frac{1}{5}$ i $\frac{4}{5}$
- B) $\frac{\pi^2}{2}$ i $\frac{3\pi^2}{2}$ *hartree* amb probabilitats, respectivament iguals a $\frac{2}{5}$ i $\frac{8}{5}$
- C) $\frac{\pi^2}{2}$ i $\frac{9\pi^2}{2}$ *hartree* amb probabilitats, respectivament iguals a $\frac{1}{5}$ i $\frac{4}{5}$
- D) $\frac{\pi^2}{2}$ i $\frac{9\pi^2}{2}$ *hartree* amb probabilitats, respectivament iguals a $\frac{2}{5}$ i $\frac{8}{5}$

6 (1 punt) Si la probabilitat d'obtenir el valor $2\hbar^2$ en fer una mesura d' $\hat{L}^2$ en l'estat de l'io He^+ descrit per la funció normalitzada $\Psi = c_1\phi_{2p_z} + c_2\phi_{3s}$ és el doble de la probabilitat d'obtenir el valor de -2/9 *hartree* quan mesurem l'energia, els coeficients c_1 i c_2 són respectivament iguals a:

A) $\sqrt{\frac{2}{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}$

B) $\frac{1}{\sqrt{3}}, \sqrt{\frac{2}{3}}$

C) $\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}$

D) $\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}$

7 (1 punt) L'estat d'un àtom d'hidrogen està descrit per la funció $\Psi = c_1\phi_{3s} + c_2\phi_{3p_0} + c_3\phi_{4p_z}$

A) La funció Ψ representa un estat estacionari i és pròpia d' $\hat{L}_z$

B) La funció Ψ no representa cap estat estacionari però és pròpia d' $\hat{L}_z$

C) La funció Ψ no representa cap estat estacionari però és pròpia d' $\hat{L}^2$ i d' $\hat{L}_z$

D) La funció Ψ és pròpia d' $\hat{H}$, d' $\hat{L}^2$ i d' $\hat{L}_z$

8 (1 punt) L'energia de l'estat fonamental d'un oscil·lador harmònic tridimensional amb constants de força $k_x = 9k_y = 16k_z$ és igual a:

A) $\frac{1}{2}h\nu_x + \frac{9}{2}h\nu_y + \frac{16}{2}h\nu_z$

B) $\frac{1}{2}h\nu_x + \frac{3}{2}h\nu_y + \frac{4}{2}h\nu_z$

C) $13h\nu_x$

D) $\frac{19}{8}h\nu_y$

9 (1 punt) Aplicant el mètode variacional lineal emprant com a funció de prova $\varphi = \sum_{i=1}^{n} c_i f_i$, essent f_i funcions reals, sempre obtindrem:

A) una cota superior a l'energia de n+1 estats.

B) cotes superiors a l'energia de tants estats com funcions f_i contingui la funció de prova.

C) l'energia exacta de l'estat fonamental i cotes superiors a l'energia d'uns quants estats excitats.

D) cotes superiors a l'energia dels dos estats de més baixa energia sempre que la pertorbació sigui petita.

10 (1 punt) Si a temps zero es mesura $\hat{L}_z$ per a un àtom d'hidrogen en un estat $\Psi = \frac{1}{2}(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z} + \Phi_{2p_x} + \Phi_{3s})$ i s'obté un valor igual a zero, en absència de qualsevol altra mesura, l'estat del sistema en un temps posterior serà igual a:

A) $\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z} + \Phi_{3s})e^{-iEt/\hbar}$

B) $\Psi = \frac{2}{\sqrt{3}}(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z})e^{-iE_2t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{3s}e^{-iE_3t/\hbar}$

C) $\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z})e^{-iE_2t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{3s}e^{-iE_3t/\hbar}$

D) $\Psi = \frac{1}{2}(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z})e^{-iE_2t/\hbar} + \frac{1}{2}\Phi_{3s}e^{-iE_3t/\hbar}$

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física

10 de Novembre de 2011

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Indiqueu quina de les següents funcions no és adequada per fer una estimació de l'energia de l'estat fonamental d'una partícula en una caixa de potencial monodimensional d'extrems 0 i b aplicant el mètode variacional

A) $\Psi = N\sin\left(\frac{n\pi x}{b}\right)$

B) $\Psi = N\cos\frac{n\pi x}{b}$

C) $\Psi = Nx(b-x)$

D) $\Psi = Nx^2(b-x)^5$

2 (1 punt) Per a un àtom d'hidrogen la funció $\Psi(r,\Theta,\varphi) = R(r)Y_{l,m_l}(\Theta,\varphi)$, on $Y_{l,m_l}(\Theta,\varphi)$ és un harmònic esfèric i $R(r)$ una funció qualsevol, és segur que

A) és pròpia d' $\hat{L}^2$ i $\hat{H}$

B) és pròpia d' $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ i $\hat{H}$

C) és pròpia d' $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$

D) és pròpia d' $\hat{L}_z$ i $\hat{H}$

3 (1 punt) El valor esperat de l'energia d'un oscil·lador harmònic monodimensional que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = N(\phi_0 + 3\phi_1 + 2\phi_2)$, amb ϕ_0, ϕ_1 i ϕ_2 funcions pròpies de l'hamiltonià i N la constant de normalització, és:

A) $\frac{76}{7}h\nu$

B) $\frac{12}{7}h\nu$

C) $\frac{10}{\sqrt{14}}h\nu$

D) $\frac{3}{2}h\nu$

4 (1 punt) Un àtom d'hidrogen es troba en un estat descrit per la funció $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{2s} + \phi_{2p_x} + \phi_{2p_y}\right)$. És fa una mesura del moment angular al quadrat i s'obté un valor igual a 2 en unitats atòmiques (u.a.). Immediatament després de fer la mesura

A) L'àtom d'hidrogen està en un estat estacionari

B) La funció que descriu l'estat de l'àtom d'hidrogen no és pròpia d' $\hat{L}^2$

C) Si es fa una mesura d' $\hat{L}_z$ només es poden obtenir els valors 0 i 1 (u.a.)

D) Si es fa una mesura d' $\hat{L}_z$ només es poden obtenir els valors 0, 1 i -1 (u.a.) amb igual probabilitat

5 (1 punt) Si volem aplicar el mètode variacional lineal:

A) Cal conèixer els valors propis del hamiltonià no pertorbat associats a les funcions de la combinació lineal
B) Cal que les funcions de la combinació lineal siguin semblants a les d'algun sistema del que es coneix la solució
C) No cal que les funcions de la combinació lineal estiguin normalitzades
D) Cal conèixer el hamiltonià de la pertorbació però no el d'ordre zero

6 (1 punt) En un oscil·lador anharmònic monodimensional amb $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$ i $|c| \ll |k|$, la correcció de primer ordre a l'energia del primer estat excitat és

A) positiva
B) negativa
C) positiva o negativa depenent del valor de la constant c
D) nul·la

7 (1 punt) Si E és un valor propi d'$\hat{H}$ n vegades degenerat i ψ_1, ψ_2, … ψ_n són funcions linealment independents tals que $\hat{H}\psi_1 = E\psi_1$,$\hat{H}\psi_2 = E\psi_2$, … $\hat{H}\psi_n = E\psi_n$,

A) Qualsevol combinació lineal de les funcions ψ_i serà pròpia d' $\hat{H}$ amb valor propi E, encara que a la combinació lineal no hi figurin les n funcions
B) Una combinació lineal de les ψ_i serà pròpia d' $\hat{H}$ amb valor propi E només si conté les n funcions
C) Quan en una combinació lineal de les ψ_i hi ha degeneració de valors propis la funció no pot ser pròpia
D) La funció resultant d'una combinació lineal de les ψ_i no és un estat estacionari

8 (1 punt) Per a una partícula en una caixa de potencial tridimensional cúbica, l'estat de la qual ve descrit per la funció

$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{a}\sin\frac{n_z\pi z}{a}$, indiqueu quina de les següents afirmacions és la correcta

A) El valor propi de l'energia de l'estat fonamental és degenerat
B) Els valors propis de l'energia tant de l'estat fonamental com de tots els estats excitats estan degenerats
C) Els valors propis de l'energia de tots els estats excitats estan degenerats
D) Els valors propis de l'energia de tots els estats excitats que no tinguin iguals els tres nombres quàntics estan degenerats

9 (1 punt) Un orbital hidrogenoide és :

A) Una funció de les coordenades d'espai i d'spin de l'electró i del nucli que configuren l'àtom d'hidrogen
B) Una funció de les coordenades d'espai de l'electró i del nucli que configuren l'àtom d'hidrogen
C) Una funció de les coordenades d'espai i d'spin d'un sol electró
D) Una funció de les coordenades d'espai d'un sol electró

10 (1 punt) En fer una mesura de l'energia de l'ió He^+ s'obté el valor de -0.5 hartree,

A) Després de la mesura l'ió es troba en el seu nivell d'energia fonamental
B) L'estat del sistema després de la mesura és no estacionari
C) Després de la mesura l'ió es troba en el primer nivell d'energia excitat
D) El valor de l'energia obtingut és incompatible amb qualsevol estat del sistema

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III

(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *31 d'octubre de 2012*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les qüestions en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Un àtom d'hidrogen està en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = N(\psi_{2p_{-1}} + \psi_{2p_x})$. La probabilitat que en mesurar L_Z obtinguem un valor de $-1\hbar$ és

A) 0
B) 1
C) 0,5
D) 0,8535

2 (1 punt) Usant com a funció de prova variacional $\psi = c_0\psi_0 + c_2\psi_2 + c_4\psi_4$, on ψ_n són les funcions pròpies de l'oscil·lador harmònic unidimensional i c_n els paràmetres variacionals, quin serà el valor aproximat de l'energia de l'estat fonamental d'una partícula de massa m que es mou sotmesa a un potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$?

A) $\frac{1}{2}h\nu$
B) $\frac{5}{2}h\nu$
C) 0
D) $\frac{9}{2}h\nu$

3 (1 punt) La funció $\Psi = N(\sin x + \cos x)$ és pròpia de l'operador

A) $\frac{d}{dx}$ amb valor propi igual a 1.
B) $\frac{d}{dx}$ amb valor propi igual a -1.
C) $\frac{d^2}{dx^2}$ amb valor propi igual a 1.
D) $\frac{d^2}{dx^2}$ amb valor propi igual a -1.

4 (1 punt) En un instant donat un àtom d'hidrogen es troba en un estat descrit per la funció $\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\Phi_{1s} + \Phi_{2s} + \Phi_{2p_z}\right)$. Si es fa una mesura de l'energia i s'obté un valor igual a -1/8 Hartree, l'estat del sistema, immediatament després de realitzar la mesura, ve descrit per

A) $\frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{1s}e^{it/2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z}\right)e^{it/8}$
B) $\frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{1s}$
C) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Phi_{2s} + \Phi_{2p_z}\right)$
D) $\frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{2s} + \frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{2p_z}$

5 (1 punt) Si un feix de partícules que passa entre els imants del muntatge de Stern-Gerlach es desdobla en 5 feixos, això vol dir que l'spin de les partícules és

A) 0
B) $\frac{1}{2}$
C) $\frac{3}{2}$
D) 2

6 (1 punt) El commutador $\left[\hat{x}^2, \hat{p}_x\right]$ és igual a

A) $2i\hbar$
B) $i\hbar$
C) $2i\hbar\hat{x}$
D) 0

7 (1 punt) Quina és la probabilitat d'obtenir el valor -0,5 Ha en mesurar l'energia d'un àtom d'hidrogen que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona normalitzada $\psi = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} r \cdot e^{-r}$?

A) 0,8660
B) 0,5000
C) 0,7500
D) 0,3333

8 (1 punt) En un oscil·lador harmònic descrit per la funció $\Psi(x) = \frac{1}{2}\Phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x)$, on c_2 és un coeficient a determinar

A) la probabilitat que en fer una mesura de l'energia s'obtingui el valor 0.5 hν és més gran que la d'obtenir 1.5 hν.
B) la probabilitat que en fer una mesura de l'energia s'obtingui el valor 1.5 hν és més gran que la d'obtenir 2.5 hν.
C) no es poden determinar probabilitats perquè l'estat no és estacionari.
D) la probabilitat que en fer una mesura de l'energia s'obtingui el valor 2.5 hν és més gran que la d'obtenir 0.5 hν.

9 (1 punt) Si l'estat d'un àtom d'hidrogen ve descrit per $\Psi = N\left(\Phi_{2p_z}\beta + \Phi_{2s}\alpha\right)$, la funció Ψ és pròpia dels operadors

A) $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$
B) $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2$
C) $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$
D) $\hat{H}, \hat{L}_z, \hat{S}^2$

10 (1 punt) La correcció de primer ordre a l'energia de l'estat fonamental per a un oscil·lador sotmès a un potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^4$ (amb c<<k) és

A) com a màxim igual a l'energia exacta.
B) igual a 0.
C) igual a $\frac{3c}{4\alpha^2}$
D) igual a $\frac{3c}{2\alpha^2}$

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *29 d'octubre de 2013*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) En l'instant $t = 0$ un oscil·lador harmònic unidimensional està en un estat descrit per la funció d'ona $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 + \phi_1)$ amb ϕ_0 i ϕ_1 funcions pròpies del hamiltonià. El valor esperat de l'energia en un instant posterior t serà:

A) $\frac{1}{2}h\nu$
B) $\frac{3}{2}h\nu$
C) $h\nu$
D) $h\nu \cdot e^{i2\pi\nu t}$

2 (1 punt) Si la funció $\psi = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(\phi_{3d_{+1}} + 3\phi_{4f_{+1}}\right)$ descriu l'estat d'un àtom d'hidrogen, les probabilitats que en mesurar L^2 i L_z obtinguem respectivament els valors $12\hbar^2$ i $-1\hbar$ seran

A) $\frac{9}{10}$ i 0
B) $\frac{1}{2}$ i $\frac{1}{2}$
C) $\frac{1}{2}$ i 0
D) $\frac{9}{10}$ i 1

3 (1 punt) En el mètode variacional lineal, les funcions que s'usen per a expressar la funció de prova variacional n'hi ha prou amb que compleixin que

A) no siguin linealment independents i compleixin les condicions de contorn del sistema.
B) estiguin normalitzades i siguin linealment independents.
C) siguin ortonormals i derivables dues vegades amb continuïtat.
D) siguin linealment independents, normalitzables, derivables dues vegades amb continuïtat i que compleixin les condicions de contorn del sistema.

4 (1 punt) Si apliquem la teoria de pertorbacions a un nivell d'energia qualsevol no degenerat d'un sistema on $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$, quina de les següents afirmacions és certa ?

A) Per calcular la correcció d'ordre 1 a l'energia del nivell cal conèixer la funció pròpia d' $\hat{H}'$.
B) La correcció d'ordre 1 a l'energia del nivell no pot ser zero.
C) La correcció d'ordre 2 a l'energia del nivell pot ser positiva, zero o negativa.
D) L'aproximació calculada a l'energia del nivell sempre és mes gran o igual que la seva energia exacta.

5 (1 punt) El commutador $\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]$ per a l'oscil·lador harmònic unidimensional és igual a

A) 0
B) $i\hbar\hat{I}$
C) $i2\hbar\hat{x}$
D) $ik\hbar\hat{x}$

6 (1 punt) Per a un sistema amb hamiltonià $\hat{H}$ i per al qual tenim un operador $\hat{A}$ que commuta amb $\hat{H}$, si fem una mesura de l'energia, llavors immediatament després de la mesura, la funció d'ona:

A) Serà pròpia d' $\hat{A}$ i ho pot ser d' $\hat{H}$.
B) Serà pròpia d' $\hat{H}$ i ho pot ser d' $\hat{A}$.
C) Serà pròpia d' $\hat{A}$ i també d' $\hat{H}$.
D) No serà pròpia ni d' $\hat{A}$ ni d' $\hat{H}$.

7 (1 punt) En el cas d'una partícula en una caixa unidimensional de potencial de parets infinites d'extrems *0* i a, quina de les següents afirmacions és certa referida a un estat qualsevol?

A) La densitat de probabilitat de trobar la partícula en l'interval [a/4, a/2] es calcula integrant la funció d'ona entre a/4 i a/2.
B) La probabilitat de trobar la partícula en l'interval [a/4, a/2] es calcula integrant la funció d'ona entre a/4 i a/2.
C) La densitat de probabilitat de trobar la partícula en l'interval [*0*, a] és 1.
D) La probabilitat de trobar la partícula en l'interval [a/4, a/2] és menor de 1.

8 (1 punt) Per a l'electró de l'àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental, indiqueu quina de les següents afirmacions és falsa:

A) L'spin pot prendre els valors +1/2 i -1/2.
B) La variable d'spin pot prendre els valors +1/2 i -1/2.
C) Els valors de la component z del moment angular d'spin poden prendre els valors +1/2 i -1/2 (en u.a.).
D) La força segons l'eix z en un electroimant disposat en aquest eix serà directament proporcional als valors +1/2 i -1/2.

9 (1 punt) En mesurar l'energia d'un àtom d'hidrogen, en l'instant t = 0, que es troba en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{14}}\left(\phi_{2p_{+1}} + 2\phi_{3p_{+1}} + 3\phi_{3d_{+1}}\right)$ obtenim el valor $-\frac{1}{18}E_h$. Quina de les següents funcions d'ona pot representar l'estat en l'instant posterior t

A) $\frac{1}{\sqrt{13}}\left(\phi_{3p_{+1}} + \frac{3}{2}\phi_{3d_{+1}}\right)$
B) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{3p_{+1}} + \phi_{3d_{+1}}\right)$
C) $\frac{e^{\frac{it}{18}}}{\sqrt{13}}\left(2\phi_{3p_{+1}} + 3\phi_{3d_{+1}}\right)$
D) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{\frac{it}{18}}\phi_{3p_{+1}} + e^{\frac{it}{18}}\phi_{3d_{+1}}\right)$

10 (1 punt) Indiqueu quina de les següents afirmacions és certa:

A) Un operador mesura un observable.
B) Un operador converteix una funció en un valor propi.
C) Un operador converteix una funció en una altra funció.
D) Un operador converteix una funció en un altre operador.

Examen de Química Física III
(test dels temes 1, 2 i 3)
Departament de Química Física *29 d'octubre de 2014*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) En l'instant $t = 0$ un oscil·lador harmònic unidimensional està en un estat descrit per la funció d'ona $\frac{1}{\sqrt{5}}(\phi_0 + 2\phi_1)$ amb ϕ_0 i ϕ_1 funcions pròpies del hamiltonià. El valor esperat i la incertesa de l'energia seran respectivament:

A) $\frac{13}{10}h\nu$; $\sqrt{\frac{37}{20}}h\nu$

B) $\frac{37}{20}h\nu$; $\frac{4}{10}h\nu$

C) $\frac{3}{\sqrt{5}}h\nu$; $\sqrt{\frac{19\sqrt{5}-36}{20}}h\nu$

D) $\frac{13}{10}h\nu$; $\frac{4}{10}h\nu$

2 (1 punt) Si la funció $\psi = \frac{1}{\sqrt{14}}\left(\phi_{2p_{-1}} + 2\phi_{3d_{+1}} + 3\phi_{4f_{+1}}\right)$ descriu l'estat d'un àtom d'hidrogen, les probabilitats que en mesurar E, L^2 i L_z en l'estat ψ obtinguem respectivament els valors $-0{,}03125\ E_h$, $12\hbar^2$ i $+1\hbar$ seran

A) $\frac{9}{14}$; $\frac{9}{14}$; $\frac{13}{14}$

B) $\frac{4}{14}$; $\frac{9}{14}$; $\frac{9}{14}$

C) 0 ; $\frac{9}{14}$; 0

D) $\frac{9}{14}$; $\frac{13}{14}$; 1

3 (1 punt) El commutador $\left[\hat{H},\hat{V}\right]$ per a un oscil·lador harmònic unidimensional de massa m compleix que

A) $\left[\hat{H},\hat{V}\right]=0$

B) $\left[\hat{H},\hat{V}\right]=i\hbar$

C) $\left[\hat{H},\hat{V}\right]=\left[\hat{V},\hat{H}\right]$

D) $\left[\hat{H},\hat{V}\right]=\left[\hat{T},\hat{V}\right]$

4 (1 punt) Si utilitzem com a funció de prova variacional per a calcular una aproximació a l'energia de l'estat fonamental de l'àtom d'hidrogen la funció $\psi = c_1\phi_{2s} + c_2\phi_{3s} + c_3\phi_{4s}$ obtindrem el resultat

A) $E = -\frac{1}{2}E_h, c_1 = 1, c_2 = c_3 = 0$

B) $E = -\frac{61}{864}E_h, c_1 = c_2 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

C) $E = -\frac{1}{8}E_h, c_1 = 1, c_2 = c_3 = 0$

D) $E = -\frac{1}{8}E_h, c_1 = c_2 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

5 (1 punt) Indiqueu la resposta falsa en relació a la funció d'ona:

A) És una funció real o complexa de les coordenades d'espai i d'spin de cada partícula.
B) El seu mòdul al quadrat té unitats de inversa de longitud per a una partícula que es mou en una única dimensió.
C) La seva norma pot ser un nombre complex.
D) El signe de la funció d'ona no té cap significat físic directe.

6 (1 punt) Quina és la probabilitat d'obtenir el valor propi $\frac{5}{2}h\nu$ en mesurar l'energia d'un oscil·lador harmònic unidimensional en un estat $\psi = Ne^{-ax^4}$ saben que $\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, ...\}$ són les funcions pròpies del seu hamiltonià:

A) $\sum_{i=1}^{d_i} \left|\langle\phi_i|\psi\rangle\right|^2$

B) $\left|\langle\phi_2|\psi\rangle\right|^2$

C) $\left|\langle\phi_2|\psi\rangle\right|$

D) 0

7 (1 punt) Quina és la probabilitat de trobar el electró a una distància del nucli menor de $4a_0$ per a un àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental?

A) 0,762
B) 0,900
C) 0,986
D) 0,990

8 (1 punt) Quina de les següents relacions d'indeterminació per a una partícula movent-se en tres dimensions i descrita per la funció d'ona ψ és falsa:

A) $\Delta_\psi x \cdot \Delta_\psi p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

B) $\Delta_\psi y \cdot \Delta_\psi p_y \geq \frac{\hbar}{2}$

C) $\Delta_\psi y \cdot \Delta_\psi p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

D) $\Delta_\psi y \cdot \Delta_\psi z \geq 0$

9 (1 punt) Un àtom d'hidrogen està en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\phi_{2p_{+1}} + \phi_{3d_{+2}} + \phi_{3p_{+1}}\right)$. Si a t=0 mesurem L_z i obtenim el valor $+2\hbar$, quin valor obtindrem si mesurem l'energia sobre el mateix àtom en un instant t posterior?

A) $-\frac{17}{34}E_h$

B) $-\frac{1}{18}E_h$

C) $-\frac{1}{8}E_h$

D) $-\frac{1}{2}E_h$

10 (1 punt) Una feix de partícules elementals que no interaccionen entre elles passa a través dels pols magnètics en un experiment d'Stern-Gerlach. Si aquest feix es desdobla en 4 feixos podem concloure que

A) són partícules de nombre quàntic d'spin 4.
B) són partícules de nombre quàntic d'spin 3/2.
C) són partícules de nombre quàntic d'spin 1/2.
D) són partícules de nombres quàntics d'spin +3/2 ; +1/2 ; -1/2 ; -3/2.

Universitat de Barcelona

Examen de Química Física III

(test dels temes 1, 2 i 3)

Departament de Química Física *29 d'octubre de 2015*

Nom i cognoms: . . . . **Grup:**

Encercleu la resposta correcta. Les respostes incorrectes descompten 1/4 de la puntuació de la qüestió. Les respostes en blanc no descompten. La puntuació indicada està referida a un total de 10 punts per al test complet (hi ha una sola resposta vàlida per a cada qüestió):

1 (1 punt) Dos operadors commuten si

A) contenen derivades respecte a les coordenades de posició de les partícules.
B) existeix un conjunt ortonormal i complet de funcions pròpies comunes als dos.
C) per a alguna funció es compleix que és indiferent l'ordre en el qual s'apliquin els operadors.
D) alguna funció que és pròpia d'un operador també ho és de l'altre.

2 (1 punt) Un partícula en una caixa de potencial bidimensional de costats a i b es troba en l'estat $\psi_{4,4}(x,y)=\frac{2}{\sqrt{ab}}\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{4\pi y}{b}\right)$. La probabilitat que en mesurar la posició de la partícula la trobem a la zona $x\in\left[0,\frac{a}{4}\right]$ i $y\in\left[0,\frac{3b}{4}\right]$ serà

A) 0,1555
B) 0,1875
C) 0,2500
D) 0,8125

3 (1 punt) Un ió d'He^+ està en l'estat descrit per la funció d'ona $\psi=\frac{1}{\sqrt{15}}\left(\phi_{2s}+2\phi_{2p_z}+\phi_{3s}+3\phi_{3p_z}\right)$. La probabilitat que en mesurar L^2 obtinguem el valor $2\hbar^2$, tenint en compte que prèviament havíem mesurat l'energia sobre aquest mateix ió i havíem obtingut el valor $-\frac{2}{9}E_h$, és

A) 0,25
B) 0,87
C) 0,90
D) 1,00

4 (1 punt) Quina de les següents funcions no és adequada per usar-se com a funció de prova variacional si volem obtenir una solució aproximada per a una partícula confinada en una caixa unidimensional de potencial de parets infinites i extrems [$-a$, $+a$]?

A) $\varphi(x)=(a+x)(a-x)$
B) $\varphi(x)=\sin\left(\frac{\pi x}{2a}+\frac{\pi}{2}\right)$
C) $\varphi(x)=\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$
D) $\varphi(x)=(2a+x)(2a-x)$

5 (1 punt) L'operador associat a un observable té només 3 valors propis: 1, 0 i -1. Si al mesurar l'observable en un estat la probabilitat d'obtenir el valor 1 és 1/2 i la d'obtenir el valor 0 és 1/4, quin serà el valor esperat de l'observable en aquest estat ?

A) 0
B) 1/4
C) 1/2
D) 3/4

6 (1 punt) L'energia i degeneració dels 3 primers nivells d'un oscil·lador harmònic tridimensional per al qual les constants de força compleixen que $k_x = k_y = 4k_z$ seran

A) $E = \frac{5}{2}h\nu_z$ i $d = 1$; $E = \frac{7}{2}h\nu_z$ i $d = 1$; $E = \frac{9}{2}h\nu_z$ i $d = 3$
B) $E = \frac{1}{2}h\nu_z$ i $d = 1$; $E = \frac{3}{2}h\nu_z$ i $d = 1$; $E = \frac{5}{2}h\nu_z$ i $d = 1$
C) $E = \frac{5}{2}h\nu_z$ i $d = 3$; $E = \frac{7}{2}h\nu_z$ i $d = 3$; $E = \frac{9}{2}h\nu_z$ i $d = 3$
D) $E = \frac{5}{2}h\nu_z$ i $d = 1$; $E = \frac{9}{2}h\nu_z$ i $d = 3$; $E = \frac{11}{2}h\nu_z$ i $d = 1$

7 (1 punt) Una combinació lineal qualsevol de funcions pròpies d'un operador $\hat{A}$ segur que és funció pròpia d'aquest operador

A) si $\hat{A}$ i $\hat{H}$ commuten.
B) si l'operador $\hat{A}$ és lineal i hermític.
C) si les funcions combinades són pròpies del hamiltonià amb el mateix valor propi.
D) si les funcions combinades són pròpies d' $\hat{A}$ del mateix valor propi.

8 (1 punt) La funció d'ona $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{2p_y}\beta - \phi_{2p_{+1}}\alpha\right)$ que descriu un estat d'un àtom d'hidrogen és pròpia dels operadors:

A) $\hat{H}$ i $\hat{L}_z$
B) $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$
C) $\hat{S}^2$ i $\hat{S}_z$
D) $\hat{L}^2$ i $\hat{S}^2$

9 (1 punt) La regió clàssicament prohibida per a l'electró d'un ió Li^{2+} en el seu estat fonamental és la part exterior d'una esfera de radi

A) 1/3 a_0
B) 2/3 a_0
C) 1 a_0
D) 4/3 a_0

10 (1 punt) Sigui un operador $\hat{A}$ tal que $\hat{A}\psi = a\psi$ i un operador $\hat{B} = \hat{A} + c$ on c és una constant real. L'operador $\hat{B}$ tindrà una funció pròpia amb el corresponent valor propi iguals, respectivament, a

A) ψ ; a
B) ψ ; $a+c$
C) $\psi + c$; a
D) $\psi + c$; $a+c$