

Química Física II.  
Curso 2003-04.  
Examen Parcial, Febrero-2004

Completa, en letras mayúsculas, los datos personales que aparecen a continuación. Lee atentamente las preguntas y responde en el espacio provisto. Puedes utilizar lapicero, bolígrafo, etc para realizar el examen. También puedes usar las partes posteriores de las hojas para anotaciones o como papel borrador. La duración prevista del examen es de tres horas. Los números entre paréntesis asociados a preguntas corresponden a la puntuación máxima de cada una de ellas.

Justifica siempre tus respuestas.

<b>Nombre y apellidos. DNI. Teléfono. Profesor/Grupo</b>
--

Pregunta 1 (20 puntos)	
Pregunta 2 (18 puntos)	
Pregunta 3 (30 puntos)	
Pregunta 4 (32 puntos)	

---

**Datos:**

Masa del electrón:  $m_e = 9.10938188 \times 10^{-31}$  kg

Constante de Planck:  $h = 6.62606876 \times 10^{-34}$  J·s

$\hbar = 1.054571596 \times 10^{-34}$  J·s

Unidades:  $1 \text{ \AA} = 10^{-10}$  m

---

**1. Cuestiones. (20 puntos)**

a) ¿Qué es un operador hermítico? ¿Porqué nos interesa que los operadores sean hermíticos? (6 puntos)

b) Determina si son hermíticos o no los operadores  $\hat{\alpha} = \frac{d}{dx}$  y  $\hat{\beta} = i\frac{d}{dx}$ . (6 puntos)

c) Escribe la ecuación de Schrödinger y explica su significado. Si el operador de Hamilton es independiente del tiempo, ¿qué forma deben tener las funciones de onda de los estados estacionarios? (8 puntos)

**2. Teoría de la medida. (18 puntos)**

Un electrón puede prepararse en un estado propio del operador de espín  $\hat{s}_z$  con valor  $m_s = \frac{1}{2}$ ,  $|\alpha\rangle$ , en uno de valor  $m_s = -\frac{1}{2}$ ,  $|\beta\rangle$ , o en una superposición de ambos  $|x\rangle = c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle$ .

a) Si lo preparamos en el estado  $|x\rangle$ , ¿qué valor o valores podemos obtener en una medida individual de  $m_s$ ? (6 puntos)

b) Medimos el valor  $m_s$  en el estado  $|x\rangle$  y obtenemos  $m_s = \frac{1}{2}$ . ¿Qué valor obtendremos si volvemos a medir  $m_s$ ? (6 puntos)

c) ¿Cual será el valor promedio de  $m_s$  en un número arbitrariamente elevado de medidas de  $m_s$  realizadas siempre sobre electrones preparados en el estado  $|x\rangle$ ? (6 puntos)

### 3. Partícula en una caja 1D. (30 puntos)

El estado fundamental del problema de la partícula de masa  $m$  encerrada en una caja monodimensional de lado  $a$  ( $V(x) = 0$  si  $0 \leq x \leq a$ ,  $V(x) = \infty$  si  $0 > x > a$ ) es  $\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ .

a) Calcula el valor esperado de  $\hat{x}$  y de  $\hat{x}^2$  en este estado. (6 puntos)

b) Calcula el valor esperado de  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$  y de  $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$  en este estado. (6 puntos)

c) Calcula  $\sigma_x^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$ ,  $\sigma_{p_x}^2 = \langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2$ , y  $\sigma_x \sigma_{p_x}$ . (6 puntos)

d) Calcula la energía (en Julios) del estado fundamental de un electrón en una caja 1D con  $a = 1 \text{ \AA}$ , y la de una pelota de tenis de 100 g en una caja 1D de  $a = 1 \text{ m}$ . (6 puntos)

e) Calcula la corrección de primer orden de la energía del estado fundamental si el sistema se somete a una perturbación de la forma  $V(x) = Ax$ . Indica las dimensiones de  $A$ . (6 puntos)

#### 4. Teoría atómica. (32 puntos)

a) Cuando describimos el estado cuántico de un átomo dando su configuración electrónica, ¿qué aproximación estamos haciendo? Describe en qué consiste y cuál es el fundamento de esta aproximación. (6 puntos)

b) Escribe los determinantes de Slater que pueden formarse con los orbitales  $\phi_{1s}$  y  $\phi_{2s}$  del átomo de Helio. (6 puntos)

c) ¿Qué configuraciones electrónicas existen en este átomo involucrando los orbitales  $\phi_{1s}$  y  $\phi_{2s}$ ? (6 puntos)

d) ¿Qué multipletes aparecen en estas configuraciones? (6 puntos)

e) Escribe los niveles  $^{2S+1}L_J$  de estas configuraciones y ordenalos por energía creciente utilizando las reglas de *aufbau* y de Hund. (8 puntos)