

COGNOMS NOM DNI

Poseu a totes les fulles el NOM i COGNOMS EN MAJÚSCULES i el vostre DNI.**Aquest examen consta de 6 preguntes.****Utilitzeu només el full assignat a cada pregunta per tal de respondre-la.****Si escau, en cada full podeu escriure per davant i per darrera.**

- Només es corregirà el que estigui escrit en bolígraf.
- Si no s'indica el contrari, cal raonar breument totes les respostes.
- Aquesta prova contribueix en un 70% a la nota final de l'assignatura.

Nota important: La còpia, trànsit d'informació, la **tinència** d'un mòbil o aparell similar (*smartphone*, tauleta, audífon, rellotge intel·ligent, rellotge o calculadora de text, etc.) durant la prova comportarà suspendre l'examen amb una nota de zero, sense perjudici d'estendre la penalització més enllà, d'acord amb els articles de la *Normativa sobre Organització, Desenvolupament i Avaluació dels Estudis de Grau de la Facultat de Ciències* i de la *Normativa Reguladora dels Processos d'Avaluació i Qualificació dels Estudiants* de la Universitat de Girona.

1) (3 punts) Els ions de Heli (${}^4_2\text{He}$) es poden observar a l'atmosfera interestel·lar. A partir del model de Bohr:

(a) Calcula el potencial d'ionització del He en el seu estat fonamental (en eV).

(b) Quina seria la freqüència de la radiació emesa que l'electró passa de $n=5$ a $n=3$?

Dades:

$m_e=9,10939 \times 10^{-31} \text{ kg}$; $m_p=1,67262 \times 10^{-27} \text{ kg}$; $m_n=1,67493 \times 10^{-27} \text{ kg}$; $R_\infty=3,28984 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$; $1\text{eV}=1,602\,177 \times 10^{-19} \text{ J}$
 $c=299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$ $h=6,626\,07 \times 10^{-34} \text{ J s}$

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad R = R_\infty \frac{m_N}{m_N + m_e}$$

1,5 punts cada apartat

(a) 54,4 eV (aquí s'havia de calcular primer la R corregida)

(b) $1,75 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$

COGNOMS NOM DNI

2) (7 punts) L'àtom de sofre té nombre atòmic $Z=16$. A la següent taula trobareu diferents configuracions electròniques que corresponen al S neutre, a alguns dels seus possibles ions, a algun estat excitat o simplement una configuració impossible.

(a) Omple la taula marcant amb una X la resposta correcta:

2,5 punts

Z=16	Configuració?			Estat d'oxidació (si s'escau)
	Fonamental	Excitat	Impossible	
$1s^2 2s^3 2p^6 3s^2 3p^3$			X	
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	X			-2
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3d^4$		X		0
$1s^2 2s^2 2p^6$	X			+6
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	X			0
$1s^2 2s^2 2p^7 3s^2 3p^2$				

(b) Per l'estat fonamental del S, representa els electrons de valència en les següents caixes orbitalàries i comenta quina és la multiplicat.

0,5

3s	3p		

Multiplicitat $2S+1=3$ (triplet)

(c) La primera afinitat electrònica (AE_1) del S és de 203 kJ/mol mentre que la segona (AE_2) és de -588 kJ/mol. Comenta de forma raonada la diferència de signe de les dues afinitats.

1 punt

Agafar un primer electró és un procés exotèrmic (entalpia negativa i afinitat positiva), mentre que el segon electró correspon a un procés endotèrmic (les repulsions amb el primer electró guanyen)

Si un dels electrons ve descrit per l'orbital:

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(4 - \frac{4}{3a_0} r \right) \rho e^{-\frac{4}{6a_0} r} \quad A_{l,m}(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta$$

(c1) Troba els nodes radials

(c2) Demostra que la probabilitat de trobar l'electró en el pla XY és zero

3 punts (1,5 per pregunta)

(a) Igualant la part radial a zero tenim 1 node $r=3a_0$

(b) El pla XY correspon a $\Theta=90^\circ$, per tant la funció s'anul·la, es tracta de un node.

COGNOMS NOM DNI

3) (10 punts) Per les següents molècules: CO_2 , SO_2 , ClO_2^- , contesta raonadament:

(a) Dibuixa la seva estructura de Lewis i digues-ne l'ordre de cadascun dels enllaços.

(b) A partir de la teoria VSEPR, digues-ne la seva geometria molecular

(c) Digues la hibridació de cadascun dels àtoms

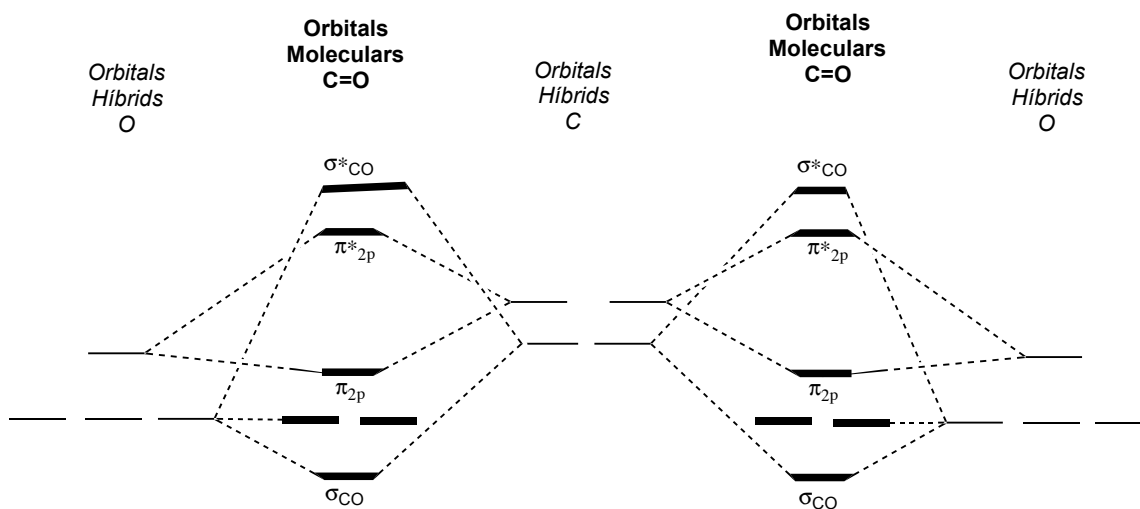
(d) En el cas de CO_2 , a continuació teniu el diagrama de orbitals moleculars a partir dels orbitals híbrids de C i l'O. Contesta les següents preguntes:

(d.1) Fes un dibuix esquemàtic dels OM a partir dels OH per la molècula de CO_2 . Dibuixa els OH per cadascun dels àtoms i després la formació dels OM. *El diagrama et pot ajudar, o el dibuix et pot ajudar a entendre el diagrama.*

(d.2) Col·loca el nom dels orbitals que falten en el diagrama

(d.3) Col·loca els electrons per cadascun dels àtoms (en els OH) i en els enllaços (OM). *Recorda que només estem representant els electrons de valència.*

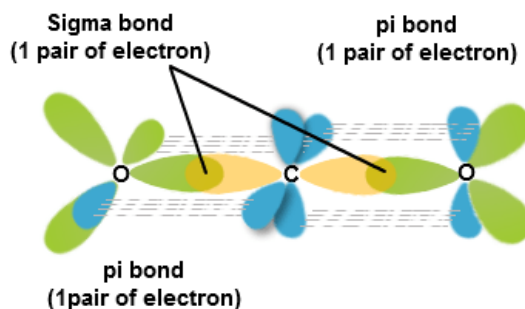
(d.4) Calcula l'ordre d'enllaç de cadascun dels enllaços



a) b) c) 4,5 punts (1,5 cada apartat)

Lewis			
Geometria	Lineal	Angular (<120°)	Angular (<109,5)
Ordre enllaç	2	2	1,5

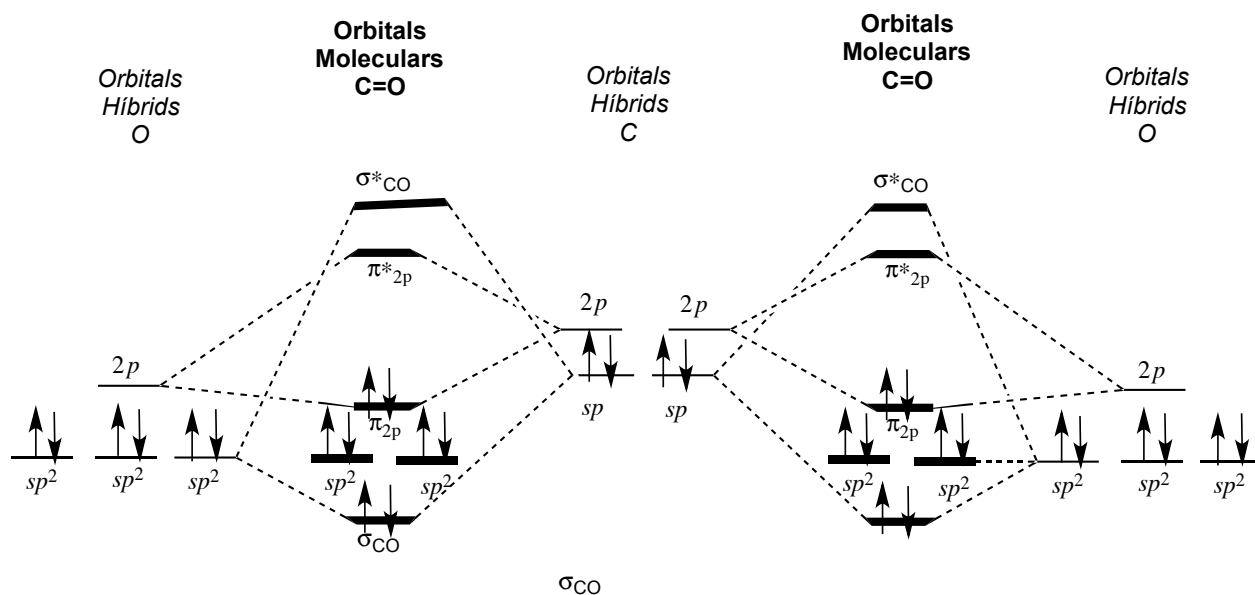
d) d.1) 1 punt



d.2) 1.5 punts

d.3) 1 punts

d.4) 1 punt



En el cas de l'enllaç CO es forma un **OM σ** i un **OM tipus π** . Veiem que aquests dos OM representen l'enllaç doblel del C=O.

Per altra banda tenim **dos OM no enllaçants** (sp^2) que representen els parells no enllaçants del O.

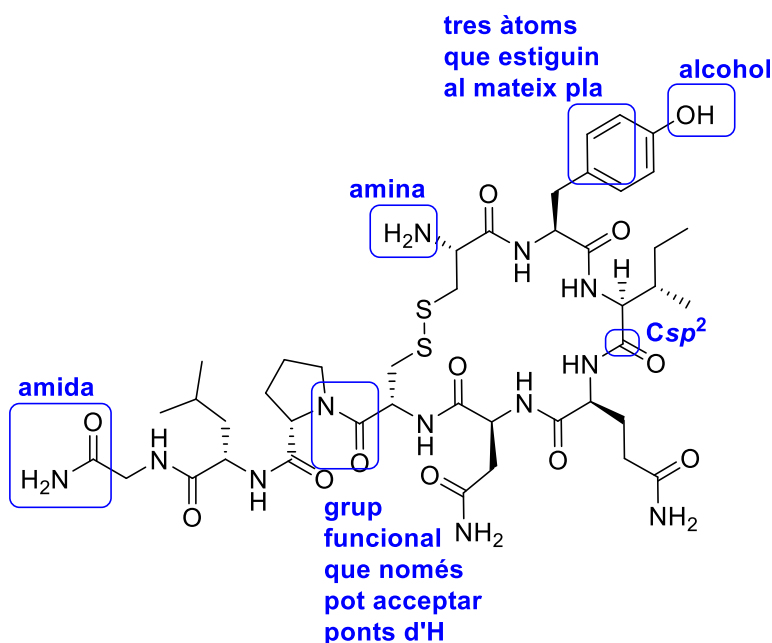
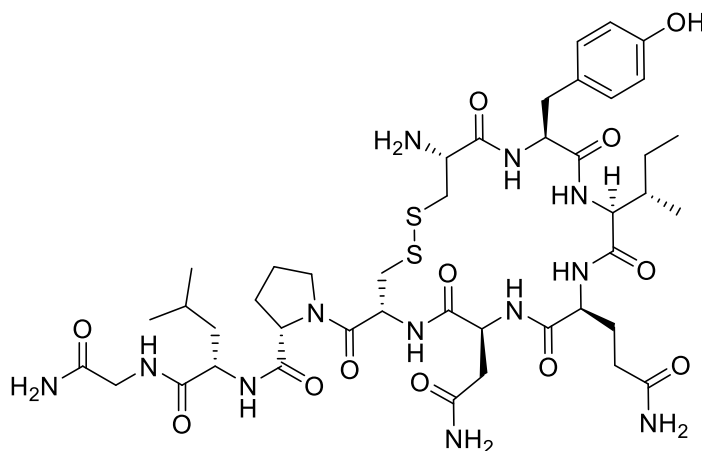
OE=2

COGNOMS NOM DNI

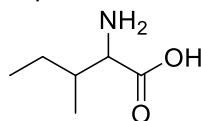
4) (10 punts) L'oxitocina, també anomenada hormona de l'amor, és una hormona que es produeix a l'hipotàlam i és secretada per la glàndula pituïtària i que actua com a hormona i com a neurotransmissor. Si ens fixem en la seva estructura, és un pèptid cíclic constituït per nou aminoàcids.

3a) (3p) Marca i etiqueta clarament a l'estructura de l'oxitocina mostrada a continuació:

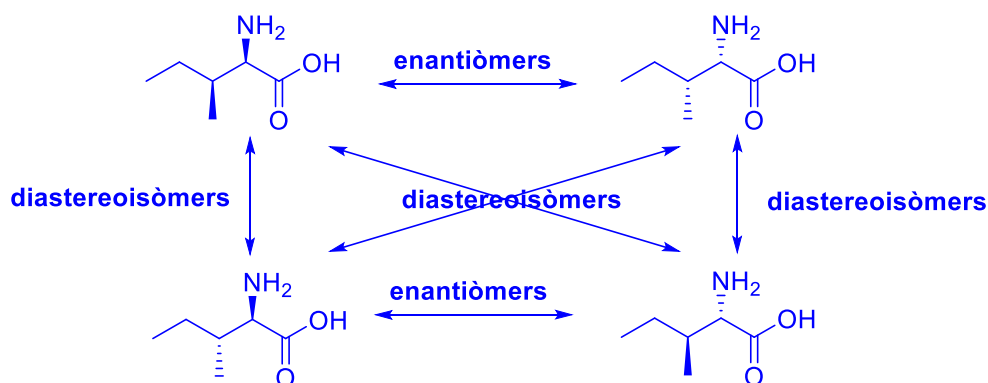
- un alcohol
- una amida
- una amina
- un carboni amb hibridació sp^2
- un grup funcional que només pugui acceptar ponts d'hidrogen
- tres àtoms que estiguin en el mateix pla



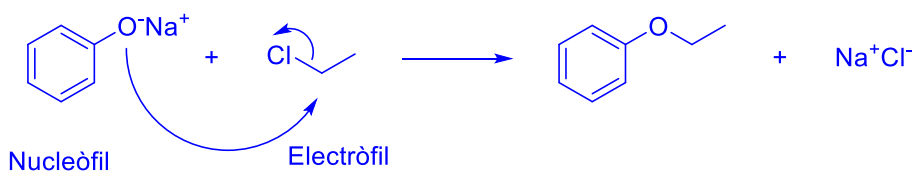
3b) (4p) Un dels aminoàcids que forma part de l'oxitocina és l'isoleucina, l'estructura del qual es mostra a continuació. Determineu els carbonis asimètrics de l'isoleucina, dibuixeu tots els possibles estereoisòmers d'aquest compost i indiqueu la relació d'isomeria que existeix entre ells (enantiòmers – diastereoisòmers).



COGNOMS NOM DNI



3c) (3p) L'oxitocina té un grup fenol. El fenol per tractament amb hidròxid sòdic genera el fenolat sòdic que pot reaccionar amb el clorur d'etil per formar etoxibenzè en una reacció de substitució nucleòfila. Dibuixa la reacció corresponent, indica quin és el nucleòfil i l'electròfil i dibuixa la fletxa que indica el corresponent moviment d'electrons.



COGNOMS NOM DNI

5) (10 punts) El beril·li i el calci tenen respectivament, les configuracions electròniques $[\text{He}]2s^2$ i $[\text{Ar}]4s^2$. Completa les frases següents

(2 punts) El beril·li és _____ (més/menys) polaritzant que el calci perquè

(2 punts) El _____ (Be/Ca) presenta el principi de singularitat perquè

(2 punts) El _____ i el beril·li presenten efecte diagonal perquè

(2 punts) El beril·li i el magnesi pertanyen al grup _____.
_____ (Si/no) presenten l'efecte del parell inert perquè

(2 punts) El radi del beril·li és més _____ (gran/petit) que el del calci. El potencial de ionització del beril·li és més _____ (gran/petit) que el del calci. Tots dos son elements _____
(poc/molt) electronegatius i tots dos són _____ (metalls/no metalls)

(10 punts) El beril·li i el calci tenen respectivament, les configuracions electròniques $[\text{He}]2s^2$ i $[\text{Ar}]4s^2$. Completa les afirmacions següents:

(2 punts) El beril·li és més (més/menys) polaritzant que el calci perquè tenen la mateixa càrrega i el radi del beril·li és menor. Aleshores, la relació Z^+/r és més gran pel Be.

(2 punts) El beril·li presenta el principi de singularitat perquè és un element del segon període i presenta una gran càrrega nuclear efectiva.

(2 punts) El Alumini i el beril·li presenten efecte diagonal perquè són elements del segon i tercer període situats en diagonal i presenten una gran similitud de radis.

(2 punts) El beril·li i el magnesi pertanyen al grup II o alcalinoterris.
No presenten l'efecte del parell inert perquè l'efecte es presenta sobretot en els grups 13 i 14.

(2 punts) El radi del beril·li és més petit que el del calci. El potencial de ionització del beril·li és més gran que el del calci. Tots dos son elements poc electronegatius i tots dos són metalls.

COGNOMS NOM DNI

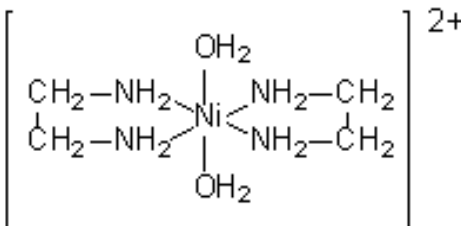
Dades:

1 H 1,008																	2 He 4,003
3 Li 6,94	4 Be 9,01											5 B 10,81	6 C 12,01	7 N 14,01	8 O 16,00	9 F 19,00	10 Ne 20,18
11 Na 22,99	12 Mg 24,31											13 Al 26,98	14 Si 28,09	15 P 30,97	16 S 32,07	17 Cl 35,45	18 Ar 39,95
19 K 39,10	20 Ca 40,08	21 Sr 44,96	22 Ti 47,87	23 V 50,94	24 Cr 52,00	25 Mn 54,94	26 Fe 55,85	27 Co 58,93	28 Ni 58,69	29 Cu 63,55	30 Zn 65,39	31 Ga 69,72	32 Ge 72,61	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,90	36 Kr 83,80
37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,91	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,94	43 Tc (98,91)	44 Ru 101,07	45 Rh 102,91	46 Pd 106,42	47 Ag 107,87	48 Cd 112,41	49 In 114,82	50 Sn 118,71	51 Sb 121,76	52 Te 127,60	53 I 126,90	54 Xe 131,29

COGNOMS NOM DNI

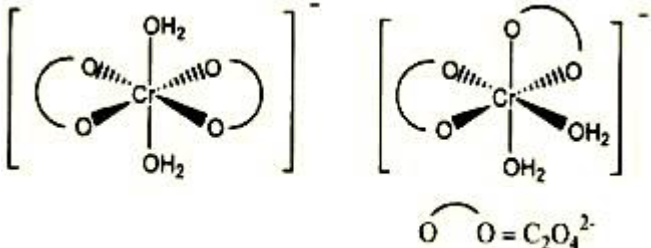
6) (10 punts) Respon les qüestions següents

(4 punts) Del complex següent, respon:

	<p>Quin és l'àtom central?</p> <p>Hi ha algun lligand neutre? Quin?</p> <p>Hi ha algun lligand aniònic? Quin?</p> <p>Hi ha algun lligand monodentat? Quin?</p> <p>Hi ha algun lligand bidentat? Quin?</p>
---	---

(6 punts) Completa la taula següent:

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{NCS})]^{2+}$ i $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{SCN})]^{2+}$	<p>Nom del primer complex:</p> <p>Tipus d'isomeria:</p>
---	---

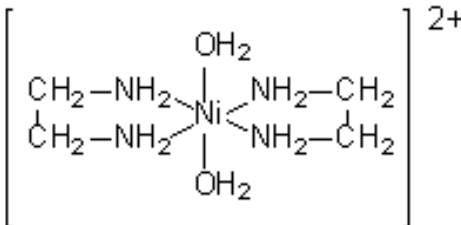
	<p>Nom del primer complex:</p> <p>Tipus d'isomeria:</p>
---	---

<p>Bromur de diamminatriaquahidroxocrom(II)</p> <p>Hidròxid de diamminatriaquabromocrom(II)</p>	<p>Dibuix dels complexos:</p> <p>Tipus d'isomeria:</p>
---	--

COGNOMS NOM DNI

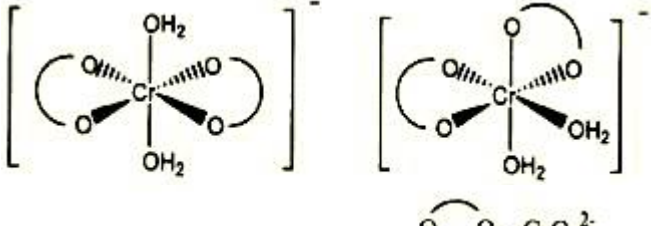
(10 punts) Respon les qüestions següents

(4 punts) Del complex següent, respon:

	<p>Quin és l'àtom central? Ni</p> <p>Hi ha algun lligand neutre? Quin? Aigua i etilendiamina</p> <p>Hi ha algun lligand aniònic? Quin? No</p> <p>Hi ha algun lligand monodentat? Quin? Aigua</p> <p>Hi ha algun lligand bidentat? Quin? Etilendiamina</p>
---	--

(6 punts) Completa la taula següent:

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{NCS})]^{2+}$ $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{SCN})]^{2+}$	<p>i</p> <p>Nom del primer complex: Pentaammina(isotiocianato)cobalt (II)</p> <p>Tipus d'isomeria: Isomeria d'enllaç</p>
---	---

	<p>Nom del primer complex: trans-diaquadioxalatocromat(III)</p> <p>Tipus d'isomeria: Geomètrica cis/trans</p>
--	---

<p>Bromur de diamminatriaquahidroxocrom(II)</p> <p>Hidròxid de diamminatriaquabromocrom(II)</p>	<p>Dibuix dels complexos:</p> <p>$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_2(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_3]\text{Br}$</p> <p>$[\text{CrBr}(\text{NH}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_3]\text{OH}$</p> <p>Tipus d'isomeria: Isomeria de ionització</p>
---	---