

TEMA 1. ESTRUCTURA ATÒMICA

1.1 Estructura dels àtoms

Isòtops

1. El carboni conté dos isòtops: 98.89% de carboni-12 ($M_{C-12} = 12$ uma, exacte per definició) i 1.11% de carboni-13 ($M_{C-13} = 13.003$ uma). Quina és la massa atòmica del carboni?
2. El N ($1s^2 2s^2 2p^3$) té dos isòtops, el ^{14}N i el ^{15}N .
 - (a) Quants protons i neutrons té cada un dels dos isòtops?
 - (b) Sabent que la massa atòmica del nitrogen és 14.0064 uma, la massa del ^{14}N és 14.0031 uma, i la massa del ^{15}N és 15.0001 uma. Quina és la proporció en % de cada un dels dos isòtops?

1.2 Radiacions electromagnètiques

3. Calculeu, si s'escau, la freqüència, la longitud d'ona, l'energia per fotó i l'energia per mol de fotó de:
 - (a) Radiació Visible
 - a.1. Vermella 600 nm
 - a.2. Groga 550 nm
 - a.3. Blava 400 nm
 - (b) Radiació UV : 200 nm
 - (c) Raig X: 150 pm
 - (d) Radiació microones: 1,00 cm
 - (e) Radiofreqüència: 3MHz
 - (f) Radiació Infraroja: 2200 cm^{-1}
4. L'espectroscòpia d'ultraviolat visible (UV-Vis) s'utilitza habitualment per determinar concentracions en mostres de proteïnes. Si una proteïna absorbeix llum a 280 nm, a quina freqüència correspon?
5. Les antenes de ràdio i televisió estan dissenyades de forma que la longitud de les seves barres sigui aproximadament igual a la longitud d'ona del senyal rebut. Si es coneix que una antena ha de rebre un senyal de freqüència $3 \cdot 10^2$ MHz, calcula la longitud de les barres de l'antena.
6. Calculeu el nombre de fotons que emet una bombeta groga de 100W en 0,1 segons. Suposem que el color groc de la bombeta correspon a una longitud d'ona de 560 nm i que la seva eficiència és del 100%.

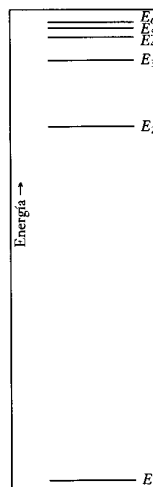
Efecte Fotoelèctric

7. S'ha realitzat un experiment d'efecte fotoelèctric a dues mostres metàl·liques. En cada cas s'ha aplicat radiació de la mateixa longitud d'ona però de diferent intensitat. La velocitat de sortida dels electrons és la mateixa en els dos casos. Podem concloure que els dos metalls són el mateix? Podria ser possible que el metall irradiat amb més intensitat presentés una funció de treball (energia llindar) diferent de l'altre?
8. La freqüència llindar pel cèssi és de $5 \cdot 10^{14} \text{s}^{-1}$. Calcular l'energia cinètica d'un electró d'aquest metall alliberat per una radiació de 550 nm.
9. La longitud d'ona llindar per al liti és de 5200 Å. Podrà una radiació amb longitud d'ona de 3600 Å ionitzar el liti? i una de 6000 Å?. **Raona la teva resposta** i calcula la velocitat que portaran els electrons emesos.
10. L'efecte fotoelèctric és a la base de la producció d'energia elèctrica a partir de la radiació solar (energia fotovoltaica). La superposició de dues fines làmines de materials semiconductors diferents, separats per una matriu, crea un camp elèctric entre elles que permetrà als electrons arrencats de la matriu per la radiació electromagnètica circular sempre en el mateix sentit, generant un corrent elèctric continu. A l'hora de construir una cèl·lula fotovoltaica, tenim la possibilitat d'utilitzar tres matrius diferents:
- Matriu α , amb una freqüència llindar de $1 \cdot 10^{15} \text{s}^{-1}$.
 - Matriu β , amb una longitud d'ona llindar de 250 nm.
 - Matriu γ , amb una funció de treball de 5.22 eV.
- (a) Quina o quines d'aquestes matrius podem utilitzar perquè la cèl·lula fotovoltaica produeixi corrent elèctric en ser irradiada amb llum de $1 \cdot 15 \cdot 10^{15} \text{s}^{-1}$ de freqüència?
- (b) Per cadascuna de les respostes afirmatives de l'apartat anterior, quina serà l'energia dels electrons despresos de la matriu? I amb quina velocitat seran despresos?
- (c) Per cadascuna de les respostes afirmatives del primer apartat, com podem augmentar la intensitat del corrent elèctric generat?
- (d) Per cadascuna de les respostes negatives del primer apartat, com podem fer que la cèl·lula fotovoltaica produeixi corrent elèctric?

Espectres Atòmics

11. Per a les següents transicions electròniques, entre els nivells d'energia de la figura, digues si la transició resultarà en l'emissió o absorció d'un fotó i classifica-les en funció de les corresponents longituds d'ona.

- $E_1 \rightarrow E_2$
- $E_2 \rightarrow E_1$
- $E_4 \rightarrow E_3$
- $E_4 \rightarrow E_5$
- $E_6 \rightarrow E_2$
- $E_6 \rightarrow E_1$



12. La freqüència corresponent a la sèrie de Lyman de l'espectre de l'àtom d'hidrogen pot representar-se per l'equació:

$$\nu = 3.2881 \cdot 10^{15} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ s}^{-1}$$

Tot raonant la teva resposta calcula:

- les línies d'aquesta sèrie de longitud d'ona màxima i mínima, en nm,
- el valor de n corresponent a la línia espectral de 95.0 nm.
- Hi ha alguna línia de 108.5 nm? Justifica-ho.

13. Per un àtom hidrogenoide, la fórmula de Balmer és

$$\nu = 3.2881 \cdot 10^{15} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{ s}^{-1}.$$

Cada fila de la taula que segueix fa referència a la *primera línia de l'espectre (la menys energètica) de la sèrie indicada*. Completa-la emprant les unitats indicades:

Sèrie	Freqüència (s ⁻¹)	Longitud d'ona (m)	Número d'ona (cm ⁻¹)	Energia (J)
Lyman				
Balmer				
Paschen				

14. En l'espectre de l'àtom d'hidrogen una de les línies de la sèrie de Balmer ($n_f=2$) correspon a una longitud d'ona de 389 nm.

- Calcula quin es el nivell de partida, n ?
- Quina serà la següent transició amb longitud d'ona superior? Calcula-la.

$$\nu = 3.2881 \cdot 10^{15} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ s}^{-1}$$

Relació entre els espectres atòmics i l'estructura atòmica. Àtom de Bohr

15. Utilitzant el model atòmic de Bohr calcula:
- (a) La freqüència de la línia menys energètica de l'espectre d'absorció de l'estat fonamental de l'àtom de H.
 - (b) La freqüència de la línia menys energètica de l'espectre d'absorció del primer estat excitat l'àtom de H.
 - (c) El potencial de ionització de l'estat fonamental de l'àtom de H.
16. Les línies de la sèrie de Balmer de l'àtom d'hidrogen vénen de les transicions entre l'estat $n=2$ i els superiors. Compareu la longitud d'ona de la segona línia de la sèrie de Balmer amb la que cal esperar per a l'ió Li^{2+} .
17. La longitud d'ona més gran de l'espectre del Li és 6700 Å (línia vermella). Calcula la diferència entre els nivells 2p i 2s del Li.
18. Calculeu per al positroni el potencial d'ionització i el nombre d'ones del salt des de l'estat $n=1$ a l'estat $n=2$, tot servint-se de la teoria de Bohr.
19. Tot suposant que el nucli de triti és exactament tres cops més pesat que el protó i que la massa de l'electró és 0,000548 cops la del protó, calculeu el percentatge relatiu de la constant de Rydberg del triti respecte a la del protó. Calculeu també l'energia d'ionització del triti comparada amb la de l'hidrogen.

1.3 Naturalesa ondulatòria de la matèria

Hipòtesi de Louis de Broglie

20. Troba la longitud d'ona de De Broglie per a:
- (a) una bala de 1.2 g que es mou a una velocitat de $1.5 \cdot 10^4$ cm/s
 - (b) un electró que té una velocitat de $3.00 \cdot 10^7$ m/s.
21. Troba la longitud d'ona de De Broglie per a:
- (a) un electró amb energia 10 keV
 - (b) una partícula de massa 125 g que es mou a una velocitat de 45 m/s.
22. Amb quina velocitat s'hauria de moure una pilota de tennis de 50 grams per què la seva ona associada fos igual a la d'un electró amb energia (cinètica) de 2.0 eV?
23. Utilitzant la hipòtesis de De Broglie:
- (a) Calcula la longitud d'ona associada a un neutró que es mou a una velocitat de 1.10^6 m/s i la que es troba associada al moviment d'un camió de 12000 Kg que es desplaça a una velocitat de 100 Km/h.
 - (b) Perquè la longitud d'ona associada a l'electró, tot i moure's més depressa, és superior a la del camió?

Principi d'incertesa de Heisenberg

- 24.** La velocitat d'un electró és de 500 m/s i ha estat mesurada amb una precisió del 0.01%. Determina la precisió màxima amb la que es pot fer la seva localització.
- 25.** La mesura de la velocitat mitja per a un electró és de 90 ms⁻¹ amb una imprecisió del 10%. Quina és la precisió màxima amb la que es pot determinar la seva posició?
- 26.** Un electró es desplaça amb una velocitat de 1.08 ms⁻¹. Si es vol determinar la posició amb una precisió de 0,010 Å, calcula el seu moment i la indeterminació comesa. Compara els resultats.
- 27.** Un electró es mou amb una velocitat de 1·10⁶ ms⁻¹. Si es determina la seva posició en una precisió de 1 pm, calcula la indeterminació en la mesura simultània de la seva quantitat de moviment. Compara la indeterminació de la mesura amb la magnitud de la seva pròpia quantitat de moviment.

1.4 Mecànica Quàntica

Postulats de la mecànica quàntica. Equació de Schrödinger

28. Demostrea si les següents funcions són funcions pròpies de l'operador derivada segona. En cas afirmatiu digues quin és el valor propi per a cadascuna de les funcions.

- (a) x^2
- (b) $3\cos(2x)$
- (c) $\sin x + \cos x$

29. Comprova si les següents funcions són funcions pròpies de l'operador energia cinètica, i dóna'n el valor propi:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

- (a) $f(x)=e^{4x}$
- (b) $f(x)=3\sin(3x)$
- (c) $f(x)=e^{x^2}$

30. Digues de les següents funcions quines seran funció pròpia dels operadors quantitat de moviment i quantitat de moviment al quadrat.

- (a) e^{-3x}
- (b) $\sin 2x + \cos 3x$
- (c) x^2

31. Comprova per a quin d'aquests operadors la funció $f(x)=\cos(3x)+\sin(3x)$ és funció pròpia. En cas afirmatiu doneu-ne el valor propi.

- (a) $\frac{d}{dx}$
- (b) $\frac{d^2}{dx^2}$
- (c) x (operador posició)

32. Comprova si la funció $f(x, y, z) = \sin(n_x x) \sin(n_y y) \sin(n_z z)$ és funció pròpia de l'operador

$$\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \text{ En cas afirmatiu trobeu-ne el valor propi.}$$

Partícula en una caixa

33. La funció d'ona associada a una partícula de massa m tancada en una caixa quàntica monodimensional de llargada a és la següent:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

(a) Demostra que aquesta funció és funció pròpia de l'operador hamiltonià:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (\text{on } \hbar \text{ és la constant de Planck})$$

(b) Demostra que el seu valor propi correspon a l'energia d'aquesta partícula:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \quad (\text{on } \hbar \text{ és la constant de Planck i } n \text{ el nombre quàntic})$$

(c) Demostra que la diferència d'energia entre dos nivells consecutius (n i $n+1$) és de:

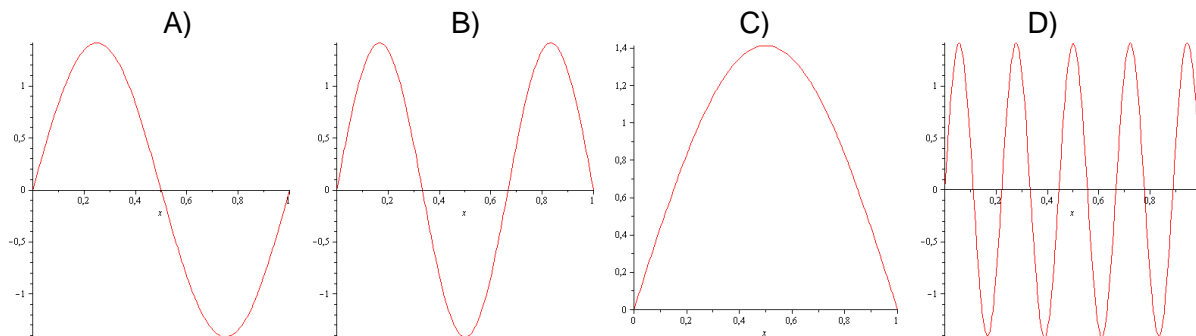
$$\Delta E_{n \rightarrow n+1} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} (2n+1)$$

Suposant que es tracta d'un electró que es troba en el seu estat fonamental tancat en una caixa de 1 \AA de longitud, troba l'energia mínima per excitar-lo.

(d) Calcula la probabilitat de trobar l'electró en l'estat fonamental dintre la primera meitat de la caixa

Dada: $\int \sin^2(t) dt = \frac{1}{2}t - \frac{1}{4}\sin(2t)$

34. A partir dels següents representacions gràfiques de les funcions d'ona corresponents a diversos estats d'una caixa quàntica de llargada 1 \AA , respon les següents preguntes de forma **raonada**:



(a) Diques quants nodes presenta cadascuna de les funcions.

(b) Diques quin nombre quàntic n està associat a cada figura.

(c) Ordena-les en ordre creixent d'energia.

(d) Quina serà la longitud d'ona de de Broglie per a l'electró en l'estat A? I en el B?

35. Un electró està confinat en un hidrocarbur lineal conjugat de longitud $a=1.0$ nm. (a) Quina és la seva energia mínima i la seva energia d'excitació mínima? (b) Si calculéssim la probabilitat de trobar l'electró entre 0 i 0.2 nm, raona si aquesta seria més gran o més petita de 0.5.

36. La funció d'ona normalitzada per a un electró en una caixa de llargada L ve donada per:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

Es coneix també la següent integral:

$$\int \sin^2 t \, dt = \frac{1}{2}t - \frac{1}{4}\sin(2t)$$

Si l'electró es troba en el segon nivell ($n=2$) i la llargada de la caixa és de 2π , justifica, sense fer cap càlcul, quant val la probabilitat de trobar l'electró en la segona meitat de la caixa? i en la primera quarta part de la caixa? Calcula aquestes probabilitats.

37. Considera la funció d'ona que descriu el segon estat excitat de la caixa quàntica monodimensional d'amplada L . Representa la corresponent funció densitat de probabilitat. En quin o quins punts de la caixa la probabilitat de trobar l'electró es fa màxima? Quina és la probabilitat de trobar l'electró entre els punts $x=L/6$ i $5L/6$?

Àtom d'hidrogen. Orbitals atòmics.

38. Omple la taula que segueix amb un valor acceptable dels nombres quàntics que falten, i digues a quin orbital correspon:

Cas	n	ℓ	m_ℓ	m_s	orbital
a)		1	0		
b)	2		-1		
c)	3	2			
d)		3	-1		

39. (a) Planteja la integral que ens serviria per calcular la probabilitat de trobar un electró en un punt de l'espai per a un orbital $2p_z$ de l'àtom d'hidrogen. (b) Planteja també la integral que ens donaria el valor mig del radi.

$$\psi_{2p_z}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos\theta$$

40. Les funcions d'ona radial i angular d'un orbital 3s de l'àtom d'hidrogen són:

$$R(r) = \frac{4}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (6 - 6\rho + \rho^2) e^{-\rho/2} \text{ on } \rho = \frac{2Z}{3a_0} r \quad \text{i} \quad Y(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

Quants nodes té? Són nodes radials, angulars o de tots dos tipus? Calcula on es troben. Justifica les teves respostes.

- 41.** Les parts radials i angulars de la funció d'ona que descriu un estat determinat de l'àtom d'hidrogen en unitats atòmiques són les següents:

$$R(r) = \frac{\sqrt{6}}{81} \left(4 - \frac{2r}{3} \right) r e^{-r/3} \quad \text{i} \quad Y(\theta, \varphi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta$$

Contesta raonadament a les qüestions següents:

- (a) Construeix la funció d'ona total.
- (b) Es tracta d'un orbital de tipus s?
- (c) Presenta nodes radials? En cas afirmatiu, determina'n la posició.
- (d) Construeix la funció de distribució radial i comprova que aquesta està normalitzada.
- (e) Per quins valors dels angles θ i φ la funció d'ona assoleix els valors màxims en valor absolut?

Dades: $\int_0^{\infty} r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ Nota: En unitats atòmiques, $a_0=1$.

- 42.** Una de les funcions per a àtoms hidrogenoids ens ve definida per la següent part angular i radial:

$$R(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \quad \text{i} \quad Y(\theta, \varphi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta$$

on Z és la càrrega nuclear i a_0 el radi de Bohr.

Respon raonadament:

- (a) Quant valen els nombres quàntics n , l ? (Recordeu que el nombre de nodes radials és $n-l-1$, i el nombre total de nodes $n-1$)
- (b) De quin orbital atòmic es tracta?
- (c) Planteja com demostraries que està normalitzada.
- (d) Troba a quin radi es troba el màxim de probabilitat de trobar l'electró al llarg de l'eix de les z .

- 43.** Una de les funcions de l'àtom d'hidrogen ens ve definida per la següent part radial i angular:

$$R(r) = \frac{4}{27\sqrt{6}a_0} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{3a_0} \right) r e^{-r/3a_0} \quad \text{i} \quad Y(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \cos \varphi$$

on a_0 es el radi de Bohr.

- (a) Determina quants nodes radials i quants nodes angulars hi ha. Calcula'ls.
- (b) Justifica perquè la probabilitat de trobar l'electró en el pla yz és zero.

- 44.** Calcula a quina distància és màxima la probabilitat de trobar un electró a l'orbital $2p_x$ de l'àtom d'hidrogen al llarg de l'eix x .

- 45.** Calcula la distància per la qual la probabilitat de trobar l'electró al llarg de l'eix de les z és màxima per a un electró $3d_z^2$.

46. Per a quin valor de r és màxima la probabilitat de trobar un electró en l'orbital $3d_{xy}$ de l'àtom d'hidrogen en la direcció que forma un angle de 45° amb els eixos x i y , i en el pla xy .

47. Per quins valors de θ i ϕ la funció ψ de l'orbital $3d_{xy}$ pren els valors màxims en valor absolut?. Determina les regions positives i negatives d'aquest orbital. Determina la posició dels plans nodals.

48. Calculeu el valor mitjà del radi per als orbitals $1s$ de l'àtom d'hidrogen. La funció d'ona

corresponent és: $\Psi_{1s} = \pi^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$

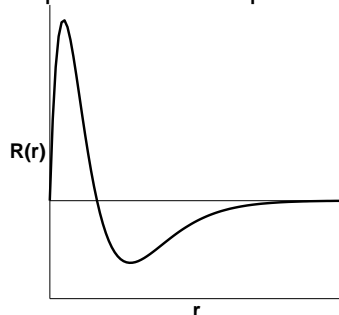
49. a) Calculeu l'expectació de l'energia potencial de l'electró de l'àtom d'hidrogen en l'estat $1s$, i b) calculeu el valor mitjà de l'energia cinètica d'aquest electró. Relacioneu els resultats amb l'energia total de l'electró.

Nota: $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$

50. Un estat d'un àtom hidrogenoide ve caracteritzat per les funcions angulars que segueixen:

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin \varphi \quad \Theta(\theta) = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$$

i per la figura qualitativa següent respecte a la seva part radial:



Determineu de quin orbital es tracta

1.5 Àtom Polieletrònic.

51. A la taula que segueix es donen les configuracions electròniques completes de diversos àtoms. Marca amb una creu si la configuració és acceptable o no. En cas afirmatiu, especifica també si es tracta d'una configuració d'un estat electrònic fonamental o excitat.

Configuració electrònica	Acceptable		Estat	
	SI	NO	Fonamental	Excitat
$1s^2 2s^1$				
$2s^1$				
$1s^2 3s^1$				
$1s^2 2s^2 2p^8 3s^1$				
$1s^2 2s^2 2p^6 2d^2$				

- 52.** Considera la subcapa $2p^3$ de la configuració electrònica de l'estat fonamental del nitrogen. Per aquests electrons indica, sense fer cap dibuix o diagrama, quins són els tres spinorbitals que s'ocupen segons la regla de Hund.
- 53.** Considera l'element arsènic ($Z=33$). Escribeu la seva configuració electrònica (de l'estat electrònic fonamental). Representa les caixes orbitàliques de Pauling dels seus electrons de valència. Indica quin spin adopten també aquests electrons.
- 54.** Fent servir les regles de Slater, calculeu Z^* per als electrons següents:
- (a) - electrons de valència del Ca
 - (b) - electrons de valència del Mn
 - (c) - electrons 3d en l'àtom de Mn
 - (d) - electrons de valència en l'àtom de Br
- 55.** Utilitzant les Regles de Slater calcula la càrrega nuclear efectiva o nombre atòmic efectiu dels ions K^+ i Cl^-
- 56.** Mitjançant les regles de Slater, calculeu la primera energia d'ionització dels àtoms de potassi i de rubidi. Compareu aquests resultats amb els experimentals ($PI(K) = 4,3 \text{ eV}$ i $PI(Rb) = 4,2 \text{ eV}$).
- 57.** Establiu les configuracions del potassi i del calci a partir del càlcul de l'energia electrònica segons les regles de Slater. Plantegeu diferents configuracions electròniques i calculeu-ne l'energia.
- 58.** La longitud d'ona de la primera sèrie espectral del Li és 6700 Å (línia vermella).
- (a) Calcula la diferència entre els nivells $2p$ i $2s$ del Li,
 - (b) amb les regles de Slater, calcula la diferència d'energia entre els subnivells **s** i **p** d'un mateix nivell,
 - (c) calcula PI_1 , PI_2 i PI_3 i comenta els resultats.
- 59.** Si a un àtom de titani li administrem l'energia necessària per a extreure-li un electró:
- (a) Extraurem un electró dels tipus $4s$ o $3d$? (b) Quina serà la configuració electrònica de l'ió