

NOM i COGNOMS DNI

Poseu el nom (en MAJÚSCULES) i el vostre DNI.

- Només es corregirà el que estigui escrit en bolígraf.
- Cal raonar breument totes les respostes.
- La part no recuperable (NR) està marcada al llarg de l'examen i té un pes del 30%.

Nota important: La còpia, trànsit d'informació, la tinença d'un mòbil o aparell similar (smartphone, tauleta, audífon,...), etc. durant la prova comportarà suspendre l'examen, 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.

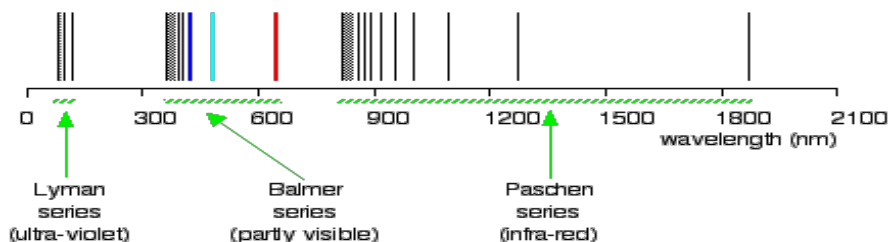
1. (15 punts NR) La posició de les línies d'emissió de l'àtom d'hidrogen es podem calcular mitjançant l'equació de Rydberg-Ritz

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Contesta de forma raonada:

- A quina transició i sèrie correspon la senyal de **longitud d'ona mínima**? Calcula'n el valor.
- Quina serà la transició de **mínima freqüència** de la sèrie de Paschen? Calcula-la.
- Calcula el potencial de ionització del l'àtom d'hidrogen en **eV i kJ/mol**.

Dades: $eV = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$,
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$,
 $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$,
 $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$,
 $R = 3.29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$



Solució (5 punts cada apartat)

- Més energètica. $n=1$ a $n=\infty$. Sèrie de Lyman. $\lambda_{\min}=91,2 \text{ nm}$
- Paschen $n=3$ Freqüència mínima: $N=3$ a $N=4$. $1,6 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
- $PI=13.6 \text{ eV} = 1331 \text{ kJ mol}^{-1}$

2. (20 punts: 5 NR + 15 NR) Un electró que es troba confinat en una caixa monodimensional de llargada $L=\pi\text{\AA}$ ve descrit per la següent funció d'ona:

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

- (a) (NR) Demosta 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) Demosta que el seu **valor propi** correspon a l'energia d'aquesta partícula.

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

- (c) Quin signe té l'energia E_n ? De **quin tipus** és?

- (d) Tot **representant** la funció d'ona al quadrat, justifica quina serà la **probabilitat** de trobar l'electró en:

d.1. La **primera meitat** de la caixa si es troba en el seu estat **fonamental**

d.2. Si es troba en el seu **primer estat excitat**, la probabilitat entre $\pi/4 < x < \pi/2$

d.3. Si es troba en el seu **quart estat excitat**, la probabilitat de trobar l'electró entre $2\pi/5 < x < 3\pi/5$

Solució

(a) i (b) es pot trobar als apunts del Tema 1 (5 punts (a) 3 punts (b))

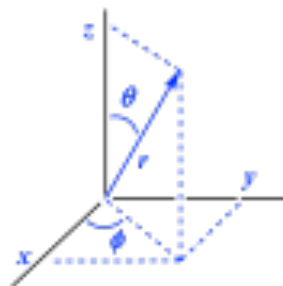
(c) Positiva, ja que es tracta d'energia cinètica (3 punts)

(d) d.1: 0,5; d.2 0,25; d.3 0,2 (3 punts cada apartat)

3. (15 punts) Una de les solucions de l'àtom de hidrogen ($Z=1$) ens ve donada per la següent combinació de part radial i part angular:

$$R(r)_{n,l} = \frac{2}{27\sqrt{6}a_0} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(4 - \frac{2}{3a_0}r \right) r e^{-\frac{1}{3a_0}r}$$

$$A_{l,m_l}(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\varphi$$



- Calcula la posició del/s node/s radial/s
- Calcula la posició del/s node/s angular/s
- Justifica de quin orbital es tracta.
- Planteja com calcularies la probabilitat de trobar l'electró en tot l'espai (tingues en compte els límits d'integració).

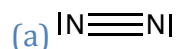
Solució

- 1 node radial $r=6a_0$ (4 punts)
- 1 node angular pla yz (4 punts)
- Es tracta de un 3px (4 punts)

(d) $\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{2px} \psi_{2px} dV$ (3 punts)

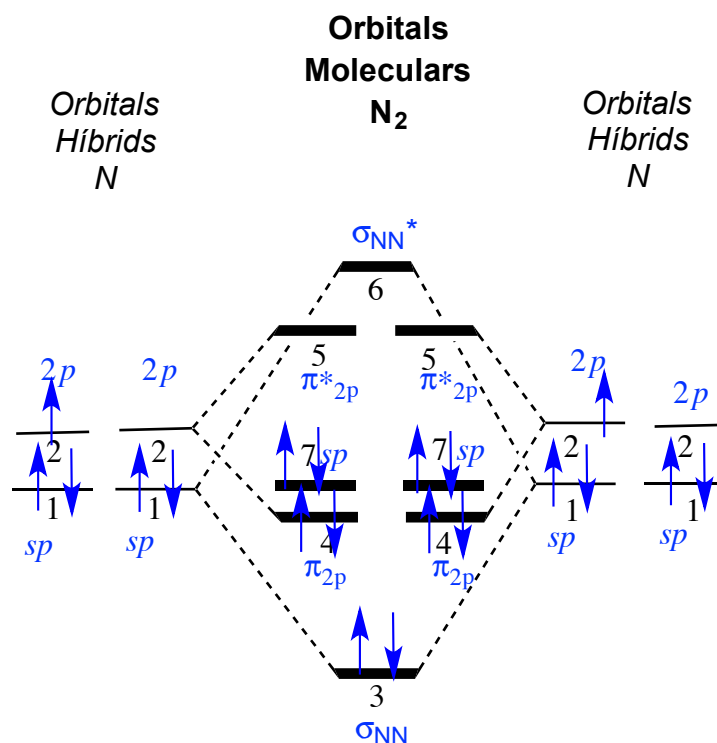
4. (20 punts: **5NR + 15**) A continuació teniu dibuixat el diagrama d'orbitals moleculars per a la molècula de N_2 ($N:Z=7$) pels electrons de valència. Per tal construir els OM s'han utilitzat els orbitals híbrids (OH) del N.

- (NR) Dibuixeu l'estructura de Lewis pel N_2
- (NR) Quina és la hibridació per cadascun dels N
- Omple la taula amb els orbitals que hi ha representats (atòmics, híbrids i/o moleculars).
En el cas dels OM digues si es tracta d'OM enllaçant, antienllaçants o no enllaçants.
S'ha posat el mateix número als orbitals que són equivalents.
- Col·loca els electrons per als OH i el OM.
- Calcula l'ordre d'enllaç per a la molècula de N_2
- Fes un esquema de la forma que tindria l'OM 3 i el 4.



(b) sp per cada N

(c) i (d) (5 punts cada apartat)



(e) $OE=3$ (2 punts)

(f) Un orbital tipus sigma i l'altre pi (tal com els trobeu dibuixats a teoria) (3 punts)

5. **(15 punts)** L'òxid de reni cristal·litza en una cel·la cúbica amb aresta de 3,742 Å. L'estructura d'aquesta sal està formada per un **catió central** i **anions** a totes les **arestes** del cub.

- (a) Troba l'**estequiometria** de l'òxid de reni
- (b) Calcula'n la seva **densitat**
- (c) **Nombre de coordinació** del O i del Re.
- (d) Sabent que el radi del reni és de 0,69Å i de l'oxigen 1,26Å, calcula el **% de volum desocupat**.

Dades: $V_{cub} = a^3$ $V_{esfera} = \frac{4}{3}\pi r^3$ $1\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$ $M(\text{Re}) = 186,2 \text{ uma}$ $M(\text{O}) = 16,0 \text{ uma}$

Solució: (4 punts cada apartat fins a 16!!!!)

- (a) ReO_3 (3 punts)
- (b) $7422,2 \text{ Kg m}^{-3}$ (4 punts)
- (c) $\text{NC}(\text{Reni})=12$; $\text{NC}(\text{oxigen})=4$ (4 punts)
- (d) 49,4 % (4 punts)

6. (5 + 10) (a) Calcula l'energia reticular pel Al_2O_3 a partir de l'equació de l'equació de Born-Landé.

(b) A partir del cicle de Born-Haber, calcula el valor de l'entalpia de formació del $\text{Al}_2\text{O}_{3(s)}$, tot coneixent les següents dades:

Entalpia de sublimació de l'alumini: $\Delta H_{\text{sub,Al}} = 305 \text{ kJ/mol}$

Primer potencial d'ionització de l'alumini: $PI_{1(\text{Al})} = 578 \text{ kJ/mol}$

Segon potencial d'ionització de l'alumini: $PI_{2(\text{Al})} = 1820 \text{ kJ/mol}$

Tercer potencial d'ionització de l'alumini: $PI_{3(\text{Al})} = 2750 \text{ kJ/mol}$

Entalpia de dissociació de l'oxigen: $\Delta H_{D(\text{O}_2)} = 498 \text{ kJ/mol}$

Primera afinitat electrònica de l'oxigen: $AE_{1(\text{O})} = 141 \text{ kJ/mol}$

Segona afinitat electrònica de l'oxigen: $AE_{2(\text{O})} = -844 \text{ kJ/mol}$

Dades:

$$U = -\frac{M|Z^+||Z^-|e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) N_A \quad M=4.1719; n=8; r(\text{O}^{2-})=1,26\text{\AA} \quad r(\text{Al}^{3+})=0,68\text{\AA}$$

Constants: $e=1.6021 \times 10^{-19} \text{ C}$, $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ part mol}^{-1}$, $\epsilon_0 = 8.85419 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$

Solució

(a) $15664,4 \text{ KJ mol}^{-1}$ (5 punts)

(b) $\Delta H_f = -1902,4 \text{ KJ mol}^{-1}$ (10 punt)