

## TEMA 1. ESTRUCTURA ATÒMICA

### 1.1 Estructura dels àtoms

#### Isòtops

1. 12,011 uma
2. 99,67%  $^{14}\text{N}$  0,33  $^{15}\text{N}$

### 1.2 Bases experimentals de la teoria quàntica

#### Radiacions electromagnètiques

3. Per fotó (J)  
 (a)  $3,313 \cdot 10^{-19}$ ;  $3,614 \cdot 10^{-19}$ ,  $4,979 \cdot 10^{-19}$  (b)  $9,929 \cdot 10^{-19}$  (c)  $1,325 \cdot 10^{-15}$  (d)  $1,988 \cdot 10^{-23}$  (e)  $1,988 \cdot 10^{-27}$  (f)  $4,376 \cdot 10^{-20}$   
 Per mol de fotons ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )  
 (a) 199,5; 217,5, 299,3; (b) 598,8 (c)  $798,0 \cdot 10^3$  (d)  $11,8 \cdot 10^3$  (e)  $1,2 \cdot 10^{-3}$  (f) 26,3
4. 1071,4 THz
5. 1 m
6.  $2,817 \cdot 10^{19}$  fotons

#### Efecte Fotoelèctric

7. Sí, No
8.  $2,35 \cdot 10^{-20}$  J
9. Si; No;  $6,11 \cdot 10^5$  m/s
10. (a)  $\alpha$  (b)  $3,3 \cdot 10^{-20}$   $v=2,69 \cdot 10^5$  m/s (c) augmentant intensitat radiació (c) només augmentant freqüència de radiació incident.

#### Espectres Atòmics

11. (f) < (a) = (b) < (e) < (c) < (d)
12. (a) 121,6 nm ; 91,2 nm (b)  $n=5$  (c) NO

13.

Sèrie	Freqüència ( $\text{s}^{-1}$ )	Longitud d'ona (m)	Número d'ona ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energia (J)
Lyman	$2,47 \cdot 10^{15}$	$1,22 \cdot 10^{-7}$	$8,22 \cdot 10^4$	$1,63 \cdot 10^{-18}$
Balmer	$4,57 \cdot 10^{14}$	$6,57 \cdot 10^{-7}$	$1,52 \cdot 10^4$	$3,03 \cdot 10^{-19}$
Paschen	$1,60 \cdot 10^{14}$	$1,88 \cdot 10^{-6}$	$5,33 \cdot 10^3$	$1,06 \cdot 10^{-19}$

14. (a)  $n=8$  (d) 397,4 nm

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

15. (a)  $2,466 \times 10^{15}$  Hz (b)  $4,567 \times 10^{14}$  c) 13.6 eV
16.  $\lambda = 4,8644 \cdot 10^{-7}$  m,  $\lambda_{Li+2} = 5,4024 \cdot 10^{-8}$  m
17. Segons el model de Bohr aquest dos nivells estan degenerats
18.  $1,09 \times 10^{-18}$  J;  $4,1138 \times 10^6$  m<sup>-1</sup>
19. a) 100.04%; b) 13,6050 eV

### 1.4 Naturalesa ondulatoria de la matèria

#### Hipòtesi de Louis de Broglie

20. a)  $3,68 \cdot 10^{-33}$  m; b)  $2,4 \cdot 10^{-11}$  m
21. a)  $1,23 \cdot 10^{-11}$  m; b)  $1,18 \cdot 10^{-34}$  m
22.  $1,52 \cdot 10^{-23}$  m·s<sup>-1</sup>
23. (a)  $3,97 \cdot 10^{-13}$  m;  $1,98 \cdot 10^{-39}$  m (b) Per l'efecte de la massa

#### Principi d'incertesa de Heisenberg

24.  $\Delta x \geq 1,16 \cdot 10^{-3}$  m
25.  $\Delta x \geq 6,43 \cdot 10^4$  Å
26.  $p = 9,838 \cdot 10^{-31}$  kg·m·s<sup>-1</sup>;  $\Delta p \geq 5,27 \cdot 10^{-23}$  kg·m·s<sup>-1</sup>
27.  $5,79 \cdot 10^7$  m/s; 5790%

#### Postulats de la mecànica quàntica. Equació de Schrödinger

28. (a) NO; (b) Sí, -4; (c) Sí, -1
29. (a)  $-\frac{8\hbar^2}{m}$ ; (b)  $\frac{9\hbar^2}{2m}$  (c) No
30. (a)  $3i\hbar$  i  $-9\hbar^2$  (b) No (c) No
31. No; (b) -9; (c) No
32. Sí;  $-(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$  (vigileu al fer la derivada parcial)

## Partícula en una caixa

33. (c) 112.9 eV (d) 0.5

34. (a) 1,2,0,8 (b) 2,3,1,9 (c)  $C < A < B < D$  (d)  $\lambda = 1 \text{ Å}$ ,  $\lambda = 0.66 \text{ Å}$

35. (a) 0,376 eV, 1,13 eV (b) petita

36. 0,5; (b) 0,25

37. Màxima probabilitat:  $\frac{L}{6}, \frac{3L}{6}, \frac{5L}{6}$  (b) 2/3

## 1.5 Àtom d'hidrogen. Orbitals atòmics

38. No hi ha una sola resposta.

39. (a)  $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi_{2p_z}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{2p_z}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$  en general. Per comprovar normalització

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi_{2p_z}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{2p_z}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1$$

$$(b) \langle r \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi_{2p_z}^*(r, \theta, \varphi) \cdot r \cdot \psi_{2p_z}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

40. 2 nodes radials, 0 nodes angulars.  $r=7,1a_0$  i  $r=1,9a_0$

$$41. (a) \psi(r, \theta, \varphi) = \frac{\sqrt{6}}{81} \left( 4 - \frac{2}{3}r \right) r e^{-r/3} \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta$$

(b) No, per què la part angular no és constant.

(c) Sí,  $r=6$  unitats atòmiques

$$(d) \frac{6}{81^2} \left( 16 \int_0^\infty r^4 e^{-2r/3} dr + \frac{4}{9} \int_0^\infty r^6 e^{-2r/3} dr - \frac{16}{3} \int_0^\infty r^5 e^{-2r/3} dr \right) = \frac{6}{81^2} \left( 16 \cdot 4! \left( \frac{3}{2} \right)^5 + \frac{4}{9} 6! \left( \frac{3}{2} \right)^7 - \frac{16}{3} 5! \left( \frac{3}{2} \right)^6 \right) = 1$$

(e) Màxims a  $\theta=0, \pi$  (per qualsevol  $\varphi$ ), per tant correspon a un orbital de tipus  $p_z$

42. (a)  $n=2, l=1$  (b)  $2p_z$  (c)  $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi_{2p_z}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{2p_z}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1$  (d)  $r_{\max}=4a_0/Z$

43. (a) 1 node radial, 1 node angular.  $R=6a_0$ ; pla  $yz$  (b) Perquè es tracta d'un node.

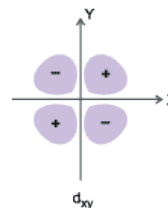
44.  $R=4a_0$

45.  $R=6a_0$

46.  $R=6a_0$

47. Màx:  $\theta=90^\circ$  i  $\varphi=45^\circ$  i  $135^\circ$ ; Plans nodals:  $\theta=0^\circ$  i  $\varphi=0$  i  $90^\circ$  ( $xy$  i  $yz$ )

48. (a)  $3/2a_0$



$$49. (a) -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}, (b) \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \text{ (exercici de dificultat alta). } E=T+V \text{ i } E=-\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

50.  $3p_y$

## 1.6 Àtoms Polieletrònics: Regles de Slater

51.

Z=15	Configuració?			Nombres quàntics de l'últim electró (n,l,m <sub>l</sub> , m <sub>s</sub> )	Estat d'oxidació (si s'escau)
	Fonamental	Excitat	Impossible		
$1s^2 2s^3 2p^6 3s^2 3p^1$			X	(3,1,0,1/2)	
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	X			(3,1,0,1/2)	-3
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3d^3$		X		(3,2,0,1/2)	0
$1s^2 2s^2 2p^6$	X			(2,1,0,1/2)	+5
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	X			(3,1,0,1/2)	0
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^1$		X		(3,1,0,1/2)	+3
$1s^2 2s^2 2p^7 3s^2 3p^2$			X	(3,1,0,1/2)	

52. els orbitals p<sub>x</sub>, p<sub>y</sub> i p<sub>z</sub> amb electrons amb spins paral·lels

53. 

↑	↑	↑
---	---	---

54. (a) 2,85 (b) 3,65 (c) 5,6 (d) 7,6

55. Fa referència als electrons més externs (3s3p) K<sup>+</sup> 7,75; Cl<sup>-</sup> 5,75

56. K 4,81 eV Rb 4,2 eV

57. K [Ar]4s<sup>1</sup> vs [Ar]3d<sup>1</sup> ; Ca [Ar]4s<sup>2</sup> vs [Ar]4s<sup>1</sup>3d<sup>1</sup>

58. (a) 1,85 eV (b) 0.0 eV; (c) 5,746 eV, 99,14 eV i 122,400 eV

59. (a) 4s [Ar]4s<sup>1</sup>3d<sup>2</sup>