

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.

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.

R1 - (10 punts) Sabent que la funció treball del sodi es de 2,3 eV:

- (a) Calculeu quina serà la radiació de màxima longitud d'ona que li pot produir efecte fotoelèctric.
- (b) Comenteu de forma raonada si una radiació de 2000 Å produirà aquest efecte fotoelèctric. Si és així, calculeu-ne l'energia cinètica màxima.

Dades: $eV = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$, $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$,

Solució (5 punts per apartat)

(a) La radiació de màxima longitud correspondrà a la funció de treball, 539,1 nm

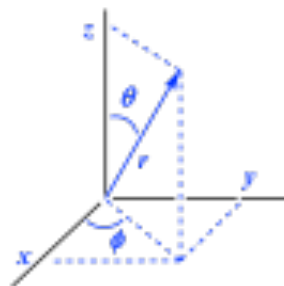
(b) Com que la longitud d'ona incident és més petita que la màxima necessària, sí que es produirà l'efecte fotoelèctric.

$$E_{\text{incident}} = E_{\text{llindar}} + E_c$$

La diferència entre l'energia incident i la llindar ens donarà l'energia cinètica: $6,23 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

R2 - (12 punts) Un electró de l'àtom d'hidrogen ($Z=1$) ens ve descrit per la següent funció d'ona (part angular i part radial). Calculeu de forma raonada:

- El nombre de nodes radials i la seva posició
- El nombre de nodes angulars i la seva posició
- Digueu de quin orbital es tracta (identificant-ne els nombre quàntics)



$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho) e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad \rho = \frac{Z}{a_0} r$$

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

Solució (4 punts per apartat)

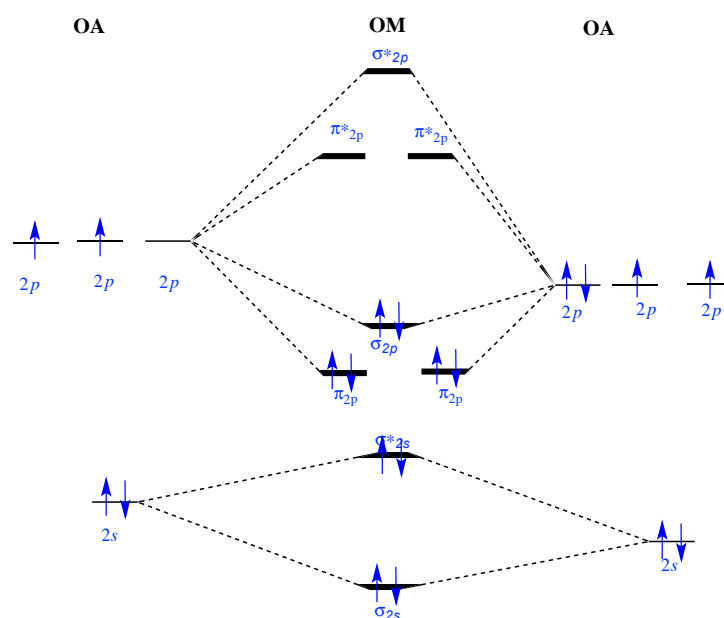
- Igualen part radial a zero: $r=2a_0$. Per tant 1 node angular.
- La part angular és constant, per tant cap node radial.
- $n-l-1=2$; $l=0$; $n=2$ Orbital 2s.

R3 - (15 punts) A continuació teniu representat el diagrama d'orbitals moleculars de la molècula de CO. De forma raonada:

- Identifiqueu, de forma raonada, quins orbitals atòmics (OA) són de l'àtom d'oxigen i quins de l'àtom de Carboni.
- Anomeneu els diferents orbitals que hi ha representats, tant els atòmics com els moleculars
- Col·loqueu els electrons en el cas del CO
- Dibuixeu de forma esquemàtica els orbitals HOMO i LUMO
- Calculeu l'ordre d'enllaç de les espècies CO, CO⁺ (catió CO) i CO⁻ (anió CO).

Solució (3 punts per apartat)

(a), (b), (c) A l'esquema



(d) HOMO és un orbital σ_{2p} mentre que el LUMO és un π_{2p}^* (trobareu la seva representació als apunts de l'assignatura)

(e) $OE_{CO}=3$ $OE_{CO^+}=2,5$ $OE_{CO^-}=2,5$

R4 - (13 punts) La segona afinitat electrònica d'alguns anions és difícil d'obtenir a partir de mesures experimentals i sovint s'obté indirectament fent servir un cicle de Born-Haber. Tenint en compte les següents dades:

Entalpia de formació del Na_2S = -364.8 KJ/mol
 Energia de sublimació del Na = 108.2 KJ/mol
 Energia de vaporització del S = 278.8 KJ/mol
 Energia de ionització del Na = 495.8 KJ/mol
 Primera afinitat electrònica del S = 200.4 KJ/mol

Dades:

$$U = -\frac{M|Z^+||Z^-|e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) N_A \quad M=2,4107; n=8; r(\text{S}^{2-})=1,77\text{\AA} \quad r(\text{Na}^+)=0,98\text{\AA}$$

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

- (a) Calculeu l'energia reticular per la sal
 (b) Calculeu la segona afinitat electrònica del sofre ($\text{S}_{(\text{g})}^- + e^- \rightarrow \text{S}_{(\text{g})}^{2-}$) a partir de les dades anteriors, tot dibuixant el diagrama de Born Haber,

Solució

- (a) -2128,5 kJ/mol (3 punts)
 (b) -477,3 (10 punts)

R5. (20 punts) R3. (20 punts) a) Formuleu i dibuixeu el compost *cis*-[amminaaquadifluoruroplatí(II)]. Formuleu, dibuixeu i anomeu el seu estereoisòmer.

b) Anomeu els complexos següents i digueu quin tipus d'isomeria presenten: $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ i $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}[\text{Co}(\text{CN})_6]^{3-}$

c) Formuleu el sulfat de pentacarbonilbromurocobalt(III). Formuleu i anomeu un isòmer de ionització d'aquest compost

d) Dels àtoms que formen els lligands del primer compost digueu, de forma raonada:

quin element és el més electronegatiu

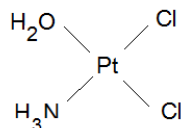
quin element és el més gran

quin element presentarà un catió més polaritzant

Dades: Els primers 10 elements de la taula periòdica són: H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne.

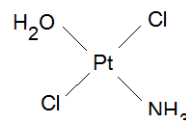
a) *Nom:* *cis*-[amminaaquadifluoruroplatí(II)]

Fórmula: *cis*- $[\text{F}_2(\text{NH}_3)(\text{OH}_2)\text{Pt}]$



Nom: *trans*-[amminaaquadifluoruroplatí(II)]

Fórmula: *trans*- $[\text{F}_2(\text{NH}_3)(\text{OH}_2)\text{Pt}]$



b) $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$: Hexacianurocromat(III) d'hexaamminacobalt(III)

$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}[\text{Co}(\text{CN})_6]^{3-}$: Hexacianurocobaltat(III) d'hexaamminacromat(III)

Són isòmers de coordinació

c) Sulfat de pentacarbonilbromurocobalt(III): $[\text{Br}(\text{CO})_5\text{Co}]\text{SO}_4$

Bromur de pentacarbonilsulfatocobalt(III): $[(\text{CO})_5(\text{SO}_4)\text{Co}]\text{Br}$

d) En el primer complex els lligands contenen els àtoms següents: H, O, N i F

El més electronegatiu és el F. Té una AE gran i un PI petit.

El més gran és el N. Els elements N, O i F tenen els seus electrons de valència en un orbital $2p$, però el N és el que té una major Z^* pel que serà més petit.

Només l'H presentarà un catió, H^+ , i és molt polaritzant ja que és molt petit i la relació q/r és molt gran

NOM I COGNOMS.....DNI.....

Posseu el nom (en MAJÚSCULES) i el vostre DNI en tots els fulls

R6. (15 punts) Per la molècula de BF_2I on $Z_B = 5$, $Z_F = 9$ i $Z_I = 53$.

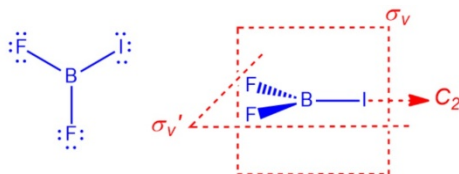
a) Amb el diagrama de flux que se us proporciona a l'últim full de l'examen, determina el seu grup puntual

b) Enumera els elements de simetria que presenta la molècula

c) Basant-vos en la resposta als apartats anteriors determina si la molècula és polar o apolar i si és quiral o aquiral.

S'ha de tenir en compte que l'àtom central serà el menys electronegatiu:

Lewis. B: $[\text{He}]2s^22p^1$, 3 ele.val.; F: $[\text{He}]2s^22p^5$, 7 ele.val.; I $[\text{Kr}]5s^24d^{10}5p^5$, 7 ele.val. 24 ele. val. totals.



VSEPR. 3 parells d'electrons al voltant de l'àtom central: geometria electrònica plana trigonal. Tots els parells són enllaçants: geometria electrònica = geometria molecular.

a) Observant la molècula en tres dimensions (en vermell):

Segons el diagrama de flux: Grup puntual C_{2v} .

b) Elements de simetria: E , C_2 , σ_v , σ_v'

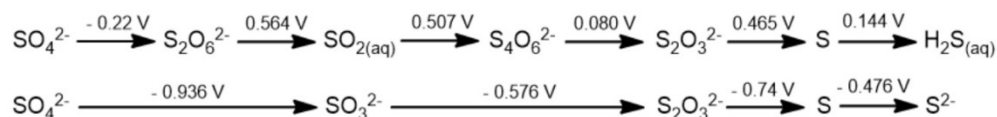
c) Molècula polar: No ha de presentar: i , S_h , o C_2 perpendiculars a l'eix principal (ha de pertànyer a un grup puntual: C_1 , C_s , C_n o C_{nv}). BF_2I pertany al grup puntual és C_{2v} i per tant és polar.

Molècula quiral: No ha de presentar cap eix de rotació impropia, S_n (incloent $S_1 = \sigma$ i $S_2 = i$). Ha de pertànyer, doncs, a un grup puntual: C_1 , C_n , D_n , T , O , o I . BF_2I pertany al grup puntual és C_{2v} i per tant és aquiral.

NOM I COGNOMS.....DNI.....

Posseu el nom (en MAJÚSCULES) i el vostre DNI en tots els fulls

R7. (15 punts) A continuació teniu els diagrames de *Latimer* del sofre en medi àcid (d'alt) i en medi bàsic (baix).



- a) Determineu si el sulfur d'hidrogen i el tiosulfat tenen tendència termodinàmica a comproportcionar en sofre elemental en medi àcid.
 b) Determineu si el sofre elemental té tendència termodinàmica a desproporcionar en sulfur i tiosulfat en medi bàsic.

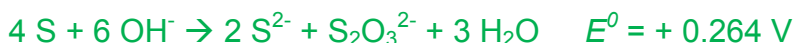
a) Segons el diagrama de *Latimer* en medi àcid:



$E^0 > 0 \rightarrow \Delta G^0 < 0$; sí tenen tendència termodinàmica a comproportcionar en sofre elemental.

b) En el diagrama de *Latimer* en medi bàsic es pot observar que el potencial a la dreta del sofre elemental (-0,476 V) és major que el potencial a l'esquerra del sofre elemental (-0.740 V). Per tant el sofre elemental, en medi bàsic, té tendència termodinàmica a desproporcionar en sulfur i tiosulfat.

Si es vol es pot comprovar numèricament:



$E^0 > 0 \rightarrow \Delta G^0 < 0$; el sofre té tendència termodinàmica a desproporcionar en sulfur i tiosulfat en medi bàsic.

NOTA: alguns de vosaltres us heu complicat intentant fer els *diagrames de Frost*. Per aquests, els *diagrames de Frost* correctes són:

