

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%** (21 punts sobre 70)

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_{NR} – (10 punts) La freqüència corresponent a la sèrie de Balmer de l'espectre de l'àtom d'hidrogen pot representar-se per l'equació:

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

Tot raonant la vostra resposta calculeu:

- (a) les línies d'aquesta sèrie de **longitud d'ona màxima i mínima**, en nm,
- (b) **el valor de n** corresponent a la línia espectral de **384.0 nm**.
- (c) Sabent que la sèrie de Lyman és la que correspon a $n_{\text{final}}=1$ i la de Pashen a $n_{\text{final}}=3$, a quina d'aquestes dues **sèries** correspondrà la senyal de **95.0 nm** (no cal calcular-ho, només justificar-ho)

Dades: $c=299\,792\,458\,m\,s^{-1}$ $h=6,626\,07 \times 10^{-34}\,J\,s$

2 - (10 punts) La funció d'ona associada a una partícula de massa m tancada en una caixa quàntica monodimensional de llargada a i la seva energia són:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad E_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}$$

(a) Demostreu que la funció és **funció pròpia** de l'operador $\hat{H} = \frac{-h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2}{dx^2}$ i trobeu-ne el seu

valor propi.

(b) Suposant que la partícula es troba en el seu **segon estat excitat**, comenteu de forma raonada (no cal fer cap càlcul):

b.1. La posició a on la densitat de **probabilitat és màxima**

b.2. La posició a on la **probabilitat** de trobar l'electró és **nul·la**

b.3. **Probabilitat** de trobar l'electró entre **L/3 i L/2**.

(c) Es coneix l'**energia de punt zero** com l'energia mínima que pot tenir el sistema.

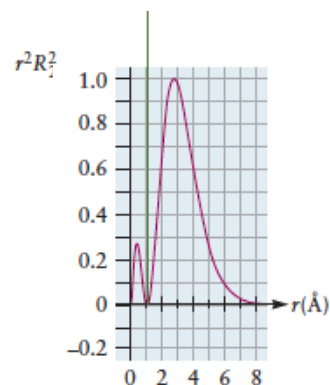
Calculeu-la en el cas d'un electró que es troba confinat en una caixa de **1nm** d'amplada.

Dades: $m_e = 9,10939 \times 10^{-31} \text{ kg}$ $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$ $h = 6,626\,07 \times 10^{-34} \text{ J s}$

3 – (9 punts) La part radial i angular d'una de les solucions de l'equació de Schrödinger per l'àtom d'hidrogen ens vénen donades per les següents funcions:

$$A(\varphi, \theta) = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2} \quad R(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{1/2} (2 - \rho) e^{-\frac{\rho}{2}} \quad \rho = \frac{r}{a_0}$$

- (a) Digueu quants **nodes radials** té la funció i a **on** es troba/en (podeu deixar la solució en funció de a_0)
- (b) Digueu quants **nodes angulars** té la funció i a **on** es troba/en.
- (c) Justifiqueu de **quin orbital atòmic** es tracta i doneu-ne una possible combinació de nombres quàntics (**n, l, m_l, m_s**)
- (d) A continuació teniu representades la funció distribució radial ($r^2 R(r)^2$) per a l'orbital anterior.
- (d.1) Quin **significat** té la funció de distribució radial?
- (d.2) Per a quin **radi és màxima la probabilitat** de trobar l'electró?
- (d.3) Compareu el valor obtingut en l'apartat anterior amb el radi trobat a partir de la teoria de Bohr: **$r = a_0 n^2$** ($a_0 = 0,529 \text{ Å}$) tot comentant quina **diferència de significat** hi ha entre els dos valors (o teories).



4 – (10 punts) Contesteu de manera raonada les següents preguntes:

(a)₆ Calculeu la càrrega efectiva i l'energia per un electró 4s i 3d de l'àtom de Cu (Z=29) i digueu-ne quin serà més fàcil d'arrencar. Quina seria la configuració electrònica del Cu⁺?

Dades: $E = -13.6 \frac{Z_{ef}^2}{n_{ef}^2} (ev)$ per $n=4$ $n_{ef}=3,7$

(b)₂ Per què l'energia de ionització de l'Al (Z=13) és més petita que no pas la del Mg (Z=12)?

(c)₂ Definiu afinitat electrònica. Comenteu de forma raonada perquè per l'àtom de nitrogen (Z=7) aquesta és aproximadament zero, mentre que pel carboni (Z=6) és de 122 kJ/mol.

5 – (5 punts) S'ha sintetitzat el compost SF_3N

(a) Dibuixeu l'estructura de Lewis tot suposant:

- a.1. El sofre com a àtom central
- a.2. El nitrogen com a àtom central

(b) Comenteu de forma raonada, a partir del resultat anterior, quina de les dues opcions anteriors hauria de ser l'estructura actual d'aquest compost.

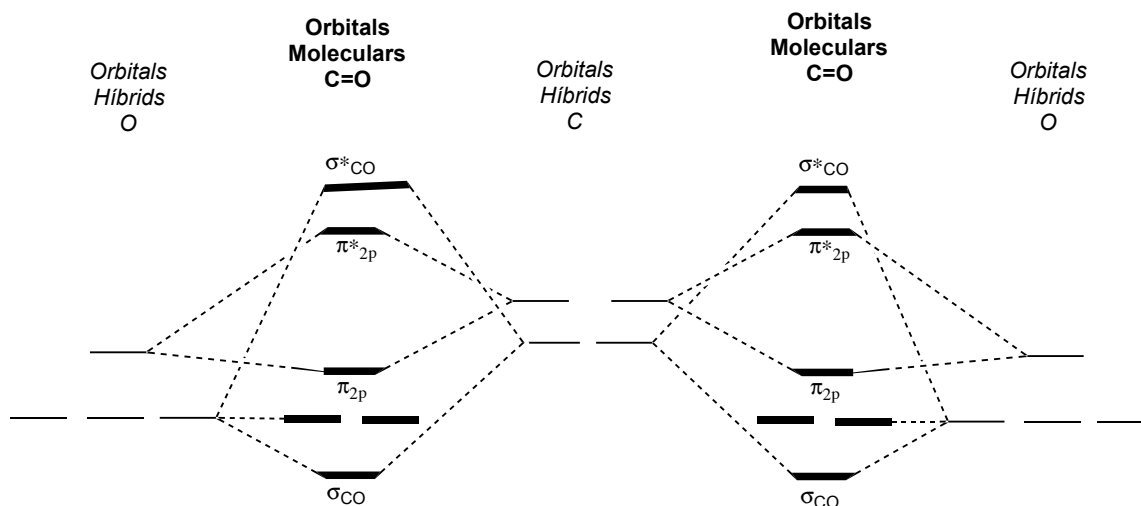
Dades: $Z(\text{N})=7$ $Z(\text{S})=16$ $Z(\text{F})=9$

6 – (5 punts) El Xe, tot i ser un gas noble, pot formar diferents compostos amb elements més electronegatius com el fluor i l'oxigen. La reacció del Xe variant la quantitat de fluor pot donar **XeF₂** i **XeF₄**. Si aquests continuen reaccionant amb oxigen, es pot obtenir, entre altres, **XeO₃**, **XeO₄** i **XeOF₄**. Dibuixeu les **estructures de Lewis** i prediu quina és la geometria de cada compost, tot comentant-ne la seva **polaritat**.

Dades: Z(Xe)=54

7 – (10 punts)

- (a) Per la molècula de CO_2 , dibuixa l'**estructura de Lewis**, prediu la **geometria** a partir de VSEPR i digueu quina és la **hibridació** per cadascun dels àtoms
- (b) A continuació teniu el diagrama d'orbitals moleculars (OM) a partir dels orbitals híbrids (OH) de C i l'O. Contesteu les següents preguntes:
- (b.1) Feu un **dibuix esquemàtic dels OM** a partir dels OH per la molècula de CO_2 . Dibuixeu els OH per cadascun dels àtoms i després la formació dels OM. *El diagrama us pot ajudar, o el dibuix us pot ajudar a entendre el diagrama.*
- (b.2) Col·loqueu **el nom dels orbitals** que falten en el diagrama
- (b.3) Col·loqueu **els electrons** per cadascun dels àtoms (en els OH) i en els enllaços (OM). *Recordeu que només estem representant els electrons de valència.*
- (b.4) Calculeu l'**ordre d'enllaç** de cadascun dels enllaços CO.



8_{NR} – (11 punts) El sòlid iònic Na₂O presenta una estructura tipus antifuorita. Contesteu de forma raonada:

- Si en la xarxa de Na₂O els anions es troben en els vèrtexs i a totes les cares, **quants ions O²⁻** tindrem per cel·la unitària? **quants Na⁺**?
- Trobeu l'energia reticular a partir de l'equació de Born-Landé.
- Mitjançant el cicle de Born-Haber (dibuixeu-lo) calculeu el potencial d'ionització del Na.

Dades:

$$r(\text{Na}^+) = 0.95 \text{ \AA}$$

$$r(\text{O}^{2-}) = 1.40 \text{ \AA}$$

$$M = 2.519$$

$$n=8$$

$$\Delta H_f(\text{Na}_2\text{O}) = -455.0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{sublim}}(\text{Na}) = 108.4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{diss}}(\text{O}_2) = 496.0 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{AE}_1(\text{O}) = 141.9 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{AE}_2(\text{O}) = -781.5 \text{ kJ/mol}$$

$$U = -\frac{M|Z^+||Z^-|e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) N_A$$

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

