

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 – (NR – 10 punts) Una radiació electromagnètica de **400nm** incideix sobre una superfície de Cs en una cel·la fotoelèctrica tot extraient electrons amb una energia cinètica màxima de **$1.54 \cdot 10^{-19} \text{ J}$** .

- Calculeu la **frequència llindar** del Cs i el **potencial d'ionització** (en eV i kJ/mol).
- Calculeu quina és la **longitud d'ona màxima** que és capaç d'arrencar els electrons al Cs.
- Calculeu la **longitud d'ona associada** als electrons que s'extreuen de la placa

Dades: $eV = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$,
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$,
 $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$,
 $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$,
 $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$

$$E = h\nu \quad E_c = \frac{1}{2}mv^2 \quad v = \frac{c}{\lambda} \quad \lambda = \frac{h}{mv}$$

(a) (6 punts)

$$E_{\text{incident}} = E_{\text{ionització}} + E_{\text{cinètica}}$$

$$E_{\text{ionització}} = 3.5 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2,17 \text{ eV} = 208,9 \text{ kJ/mol}$$

$$\nu_{\text{llindar}} = 5,2 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

(b) (2 punts) La que li correspon a la freqüència llindar: $\lambda_{\text{max}} = 577 \text{ nm}$

$$(c) (2 punts) \lambda = \frac{h}{mv} = 1,27 \text{ nm}$$

2 - (10 punts) Durant el curs hem introduït el concepte d'enllaç doble entre àtoms de carboni, el qual el representem com $C=C$, amb una distància entre àtoms de C de $1,34 \text{ \AA}$. El moviment d'un electró en aquest enllaç es pot modelar com una **partícula en una caixa monodimensional** de llargada (L) igual a la distància d'enllaç.

- (a) A partir de la funció d'ona que descriu el comportament d'aquest electró dins d'aquest model, trobeu que l'**energia per a un nivell n** qualsevol es pot expressar com:

$$E_n = 20,96n^2 \text{ (en eV)}$$

- (b) Calculeu l'**energia mínima** necessària per **excitar** l'electró des del seu estat fonamental.
 (c) Si es fa incidir una radiació de **1,7 nm**, calculeu a quin **nivell final** es trobarà l'electró.
 (c) Justifiqueu (gràficament) a **quina distància** del àtom de C serà **més probable** trobar l'electró quan aquest està en el seu estat fonamental.
 (d) Justifiqueu quina serà la **probabilitat** de trobar l'electró a una **distància de 0,67 Å** del C quan aquest es troba en el seu **primer estat excitat**.

Dades

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad \hat{H} = \frac{-\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (\text{on } h \text{ és la constant de Planck i } m \text{ la massa de la partícula})$$

2 punts per apartat!

(a)

$$\frac{-\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8\pi^2 m L^2} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2} = 20,96n^2$$

(b) Per passar de $n=1$ a $n=2$

$$\Delta E_{1 \rightarrow 2} = 62,8 \text{ eV}$$

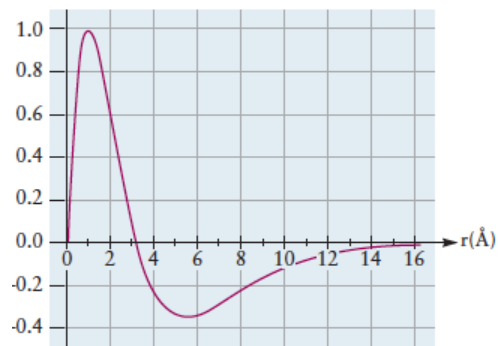
$$(c) \Delta E_{1 \rightarrow n} = h \frac{c}{\lambda} = 1,1710^{-16} \text{ J} = 20,94n^2 - 20,94 \quad n = 6$$

(d) Com que es tracta de $n=1$, al mig de la caixa (0,67 Å)

(e) Just en aquest punt, quan $n=2$ hi ha un node, per tant la probabilitat seria nul·la.

3 – (10 punts) En la figura adjunta es troba la representació de la part radial d'una de les solucions de l'àtom de hidrogen. Se sap que aquesta solució s'anul·la quan els angles θ i ϕ valen 0 tots dos.

- (a) Diguen quants **nodes radials** té la funció i a on es troba/en (aproximadament).
- (b) Diguen quants **nodes angulars** té la funció i a on es troba/en.
- (c) Justifiqueu de **quin orbital atòmic** es tracta.
- (d) Doneu-ne una possible combinació de nombres quàntics associats a aquest orbital (**n, l, m_l, m_s**)



- (a) **(3 punts)** Veiem que té només 1 node radial a $r \approx 3.5 \text{\AA}$ aproximadament
- (b) **(3 punts)** 1 node angular, tal com diu l'enunciat, al pla xz
- (c) **(2 punts)** $3p_y$
- (d) **(2 punts)** $(3, 1, 1, 1/2)$

4 – (NR – 9 punts; R - 6 punts) Justifiqueu de **forma raonada** les següents afirmacions:

$Z(\text{Mg})=12$; $Z(\text{Al})=13$; $Z(\text{N})=7$; $Z(\text{P})=15$; $Z(\text{Cr})=24$; $Z(\text{Mn})=25$

(a)_{NR} La primera energia d'ionització del Mg és de 0,74eV mentre que la segona és de 1,45 eV.

(3 punts) – L'apantallament és menor un cop s'ha arrencat un electró (càrrega efectiva major)

(b)_{NR} La primera energia d'ionització del Mg és de 0,74 eV mentre que la del Al és de 0,58 eV

(3 punt) – Configuració electrònica. Més estable la del Mg, i per tant costa més arrencar electró.

(c)_{NR} La càrrega efectiva del N és igual que la càrrega efectiva del P – Anul·lada (errada meva)*

(d) La configuració electrònica més estable del Cr és $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$

(3 punts) - Seria $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$, però és més estable la configuració de mitja capa plena, per tant serà més estable $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$

(e) Els estats d'oxidació del Mn més estable són el +2, +4 i +7.

(3 punts) Mn és $[\text{Ar}] 3d^5 4s^2$

Mn^{+2} és $[\text{Ar}] 3d^5$

Mn^{+7} és $[\text{Ar}]$

Mn^{+4} és $[\text{Ar}] 3d^3$ – Es aquest cas no és trivial (per tant no avaluaré justificació)

** S'ha optimitzat la puntuació de la part no recuperable. Si la resposta de la pregunta c ajudava a pujar-ne la nota es tenia en compte, no pas si aquesta penalitzava.*

5 – (10 punts) Per els següents compostos de nitrogen: NO_3^- , NO_2^- i NO_2^+ contesta de forma raonada:

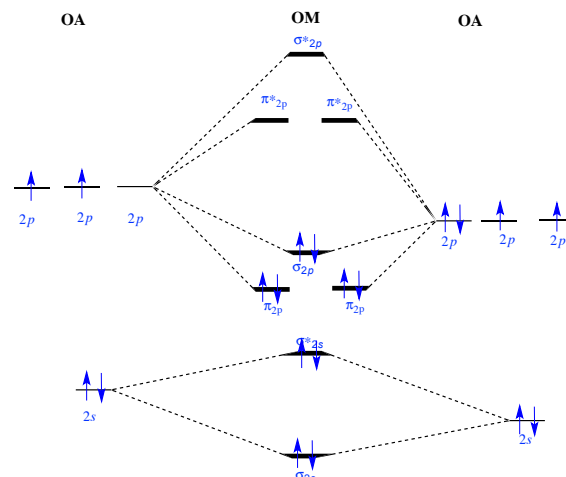
- Dibuixeu-ne les estructures de **Lewis**
- Prediu-ne la geometria a partir del mètode **VSEPR**
- Digueu quin seria l'**ordre d'enllaç** NO en cada cas i ordena les molècules segons la seva distància.
- Quina **hibridació** presentaria el nitrogen central per poder predir la geometria anterior?

Dades: $Z(\text{N})=7$ $Z(\text{O})=8$

Lewis (4 punts 2 punt el primer i 1 el segon i tercer)			
Geometria (1,5 punts)	Plana trigonal	angular	lineal
Angle	120°	$<120^\circ$	180°
Ordre d'enllaç (tenint en compte els estructures ressonants) (1,5 punts)	$4/3$	$3/2$	2
Ordre de fortalesa (1,5 punts)	3	2	1
Hibridació (1,5 punts)	sp^2	sp^2	sp

6 – (10 punts) A continuació teniu el diagrama d'orbitals moleculars per la molècula de CO. De forma raonada contesteu les següents preguntes:

- Identifiqueu els àtoms A i B.
- Col·loqueu els electrons en els orbitals atòmics i orbitals moleculars i escriviu-ne la configuració electrònica.
- Calculeu l'ordre d'enllaç per a la molècula de CO, CO^+ , CO^{2+} , CO^- i CO^{2-} . Classifiqueu-les segons la seva distància d'enllaç.
- Identifiqueu i feu una representació de la forma que tindrà el HOMO i el LUMO per a la molècula de CO.



Dades: $Z(\text{C})=6$ $Z(\text{O})=8$

(a) (2 punt) A Carboni (menys electronegatiu) –

(b) (2 punt). $\psi = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^4 (\sigma_{2p})^2$

(c) 2,5 per l'ordre d'enllaç i 1,5 per ordre distància

CO	CO^+	CO^{2+}	CO^-	CO^{2-}
3	2,5	2	2,5	2

$$R_{\text{CO}} < R_{\text{CO}^+} \approx R_{\text{CO}^-} < R_{\text{CO}^{2+}} \approx R_{\text{CO}^{2-}}$$



- (d) (2 punts)
- | | | | |
|-----------------|------|----------------|--------------------|
| (σ_{2p}) | HOMO | HOMO (bonding) | LUMO (antibonding) |
| (π_{2p}^*) | LUMO | | |

7 – (NR – 5 punts; R – 10 punts) En l'estructura de Li_2S els sofres es troben formant un empaquetament compacte, ocupant els vèrtexs i totes les cares de la cel·la unitària. Contesteu els següents apartats tot raonant la vostra resposta:

- (a) **NR** Sabent que els Li es troben en tots els **forats tetraèdrics**, quin és el seu **nombre de coordinació**?
- (b) **NR** **Quantes molècules** de Li_2S hi ha per cel·la unitària?
- (c) Si la longitud de la cel·la unitat es de 588 pm, determina la **densitat del Li_2S** .
- (d) A partir de les següents dades, i tot dibuixant el cicle de **Born-Haber**, calculeu l'**energia reticular** del compost anterior.
- (e) Determineu el **radi del Li^+** a partir de les dades anteriors.

Dades:

$\Delta H_f(\text{Li}_2\text{S}) = -499 \text{ kJ/mol}$ (es forma a partir del Li(s) i el $\text{S}_8(\text{s})$)

$\text{S}_{8(\text{s})} \rightarrow 8\text{S}_{(\text{g})} \quad \Delta H = 2176 \text{ kJ/mol}$

$\text{S}_{(\text{g})} \rightarrow \text{S}^{-}_{(\text{g})} \quad \Delta H = -200 \text{ kJ/mol}$

$\text{S}^{-}_{(\text{g})} \rightarrow \text{S}^{2-}_{(\text{g})} \quad \Delta H = 532 \text{ kJ/mol}$

$\text{Li}_{(\text{s})} \rightarrow \text{Li}_{(\text{g})} \quad \Delta H = 161 \text{ kJ/mol}$

$\text{Li}_{(\text{g})} \rightarrow \text{Li}^{+}_{(\text{g})} \quad \Delta H = 520 \text{ kJ/mol}$

$m_{\text{Li}} = 6.9 \text{ gr/mol} \quad m_{\text{S}} = 32 \text{ gr/mol}$

$$V_{\text{cub}} = a^3 \quad V_{\text{esfera}} = \frac{4}{3}\pi r^3$$

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

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) (2 punts) $\text{NC}=4$ (ocupa forats tetraèdrics)
- (b) (3 punts, 1 per S i la resta per molècules) Si S ocupen vèrtex i cares vol dir que hi ha 4 ions de S^{2-} per cel·la, per tant 4 molècules de Li_2S .
- (c) (3 punts) $1496,4 \text{ kg m}^{-3}$
- (d) (5 punts) $-2456 \text{ kJ mol}^{-1}$
- (e) (2 punts) $0,57 \text{ \AA}$