

1.- El nombre atòmic del niobi és $Z=41$.

- a) Escriu la seva configuració electrònica i indica el seu nombre d'oxidació màxim.
- b) Determina el grup, període i bloc d'elements als que pertany.
- c) Quants electrons desaparellats té l'ió Nb^{2+} en el seu estat fonamental?
- d) Quin és el nombre atòmic del tàntal, que és l'element que està a sota del niobi a la taula periòdica?
- e) A quin efecte es deu que els radis atòmics del Nb ($1.46 \text{ \AA}$) i el Ta ($1.46 \text{ \AA}$) siguin pràcticament iguals?
- f) Calcula la constant d'apantallament d'un electró 3d del Nb segons les regles de Slater.
- g) El niobi metàl·lic cristal·litza en una cel·la cúbica centrada en el cos. Quin és el seu nombre de coordinació, quants àtoms hi ha a la cel·la i quant val l'aresta de la cel·la unitària?

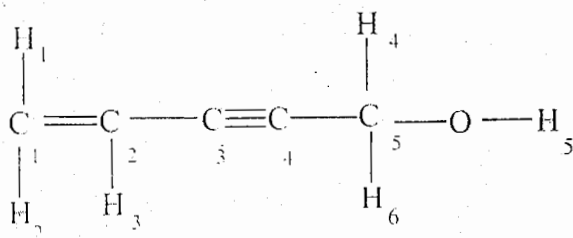
2a.- El tel·luri, element del grup 16, forma amb el fluor varis compostos neutres i iònics (cations i anions). Escriu les fórmules de les espècies que presenten les següents estructures:

- a) Forma de T.
- b) Trigonal piramidal.
- c) Plano quadrada.
- d) Cadira de muntar ("papallona").

2b.- Dibuixa les estructures de Lewis de les molècules següents. Indica a més, per a cada una, la seva geometria, les càrregues formals dels seus àtoms, l'ordre de cada enllaç i si té o no moment dipolar.

- a) Ió hidroni, H_3O^+ .
- b) Ió hidrogencarbonat, HCO_3^- .
- c) Disulfur de carboni, CS_2 .

3.- Considera la molècula orgànica que presenta la següent cadena carbonada:



(Nota: els àtoms de carboni de la molècula s'han numerat de l'1 al 5, i els d'hidrogen de l'1 al 6).

a) Indica els orbitals híbrids que fa servir cada àtom de carboni:

C₁:

C₄:

C₂:

C₅:

C₃:

b) Indica els valors dels angles d'enllaç següents:

H₁-C₁-H₂:

C₁-C₂-H₃:

C₃-C₄-C₅:

H₄-C₅-O:

C₅-O-H₅:

c) Ordena de la més petita a la més gran les distàncies d'enllaç CC entre àtoms veïns.

d) Ordena de la més petita a la més gran les energies d'enllaç CC.

4.-

- a) Dibuixa el diagrama d'energia dels orbitals moleculars de l'ió OH^- , tenint en compte que les energies dels orbitals atòmics de l'oxigen son: $2s : -32.3 \text{ eV}$; $2p : -15.9 \text{ eV}$, i que la del orbital atòmic $1s$ de l'hidrogen és -13.6 eV .
- b) Escriu la seva configuració electrònica i analitza el caràcter enllaçant o no dels orbitals moleculars.
- c) Escriu la funció d'ona de l'orbital molecular de menor energia i la d'un orbital π .
- d) Dibuixa també el diagrama d'energia dels orbitals moleculars de la molècula C_2 .
- e) Pel C_2 discuteix les seves propietats magnètiques i calcula l'ordre d'enllaç CC.
- f) Escriu la funció d'ona de l'orbital molecular de menor energia i la d'un orbital π .

5.- El coure i l'or formen un compost intermetàl·lic que cristal·litza en una cel·la amb els àtoms de coure als vèrtex i en els centres de dues cares oposades. Els àtoms d'or es troben al centre de les altres quatre cares.

S'assumeix que la cel·la és cúbica. Els radis atòmics són: $r(\text{Cu}) = 1.44 \text{ \AA}$ i $r(\text{Au}) = 1.28 \text{ \AA}$.

Les masses atòmiques són: $\text{PA}(\text{Cu}) = 63.5$ i $\text{PA}(\text{Au}) = 197 \text{ g/mol}$.

- a) Quina és la fórmula del compost i quin tipus de cel·la es forma?
- b) Quin són els nombres de coordinació del Cu i del Au?
- c) Estableix quins àtoms estan en contacte:
 - i) Els àtoms d'or del centre d'una cara amb els de coure dels vèrtexs.
 - ii) Els àtoms d'or de cares adjacents.
- d) Calcula la densitat del compost.
- e) Calcula la fracció d'espai buit.

6.-

- a) Representa gràficament la variació de l'energia d'un fotó amb la seva longitud d'ona
- b) Indica els valors dels angles θ i ϕ que defineixen la direcció del màxim de l'orbital $2p_y$.
- c) Dibuixa una gràfica de la densitat de probabilitat radial d'un orbital $2p$.
- d) Quin òxid és més bàsic, el Na_2O o el K_2O ?
- e) Escribeu per ordre creixent del seu primer potencial d'ionització els elements carboni, nitrogen i oxigen.
- f) El LiH té un 77 % de caràcter iònic. Si la distància Li-H és de $1.6 \text{ \AA}$, calcula el seu moment dipolar (càrrega de l'electró: $1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$).
- g) Calcula l'entalpia de formació de l'aigua a partir de les dades següents:
 - Energies d'enllaç (kJ/mol): H-H : 435; O=O : 494; O-H : 463.
 - Entalpia de vaporització de l'aigua: $\text{H}_2\text{O (l)} \rightarrow \text{H}_2\text{O (g)}$: 44 kJ/mol .
- h) Ordena per ordre creixent de temperatures de fusió els següents compostos: NaCl , CaO , MgO , H_2O .
- i) Quin dels següents compostos té una temperatura d'ebullició més alta? N_2 , CO_2 , SO_2 .
- j) Quin dels compostos següents té una temperatura d'ebullició més alta?: HF , HCl , CH_4 .