

1.- Donat l'element Cr (Z=24) en el seu estat electrònic fonamental, indiqueu:

- Quina és la configuració electrònica d'aquest element i quina la del seu ió Cr^{+3} .
- Quin dels seus orbitals plens o parcialment plens té el nombre quàntic n més gran i quin té el nombre quàntic l més gran.
- A quin bloc de la Taula Periòdica pertany aquest element.
- Quins orbitals de la capa de valència tenen una degeneració més alta i quin és el valor d'aquesta degeneració.
- Quants electrons desaparellats tenen el Cr i l'ió Cr^{+3} en el seu estat fonamental.
- Ordeneu segons ordre creixent de radi Cr, Cr^{+2} i Cr^{+3} .
- Ordeneu per ordre creixent del primer potencial d'ionització Cr, Cr^{+2} i Cr^{+3} .
- Quin seria el comportament magnètic de l'element Cr i el dels seus ions Cr^{+2} i Cr^{+3} .
- Quin és el màxim estat d'oxidació possible per l'element Cr.
- Escriviu la fórmula d'un compost de Cr en el seu estat d'oxidació màxim.

Cr (Z=24)

excepte $\rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

1s/
2s 2p/
3s 3p 3d
4s 4p 4d 4f

$\text{Cr}^{+3}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 \rightarrow 3e^-$

elements metals de transició

4s	
3d	$\rightarrow 3 \quad 2 \quad -2$
	-1
	0

Cr $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$

6e⁻ desaparellats

$\text{Cr}^{+3} \quad \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \quad 3e^-$

(+6)

$\text{Cr} \rightarrow \text{Cr}^{+3} + 3e^-$

$\text{Cr}^{+2} \rightarrow \text{Cr}^{+3} + 1e^-$

$\text{Cr}^{+3} \rightarrow \text{Cr}^{+4} + 1e^-$

f) $\text{Cr}^{+3} < \text{Cr}^{+2} < (\text{Cr})$ radi

$\text{Cr}^{+3} \leftarrow \text{Cr}^{+2} + 1e^-$

H_2CrO_4 àcid cròmic. $3d^4 \rightarrow 3d^3$

↑ pI

g) $\text{Cr} < \text{Cr}^{+2} < \text{Cr}^{+3}$

h) $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$
 $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$

paramagnètics los 3.

(2)

(+6)

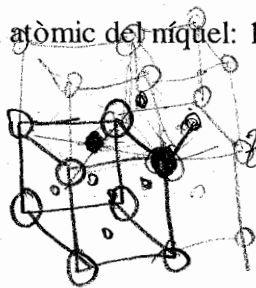
H_2CrO_4 : é. cròmic.

2.- Sabent que el níquel presenta una estructura cúbica centrada a les cares (cúbica compacte), contesteu les següents qüestions:

- Dibuixeu la cel·la elemental, digueu quants àtoms conté i quin és el nombre de coordinació de cadascun dels àtoms.
- Indiqueu en quina direcció els àtoms de Ni estan en contacte i quina és la fracció de volum desocupat d'aquesta cel·la.
- Calculeu la densitat d'aquest metall.
- Escriviu el cicle de Born-Haber per l'òxid de Ni(II) i dedueu una expressió per calcular l'energia reticular de l'òxid segons aquest cicle.

Dades: Radi atòmic del níquel: 1.25 Å; massa atòmica: 58.7

Ni



$$Z = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 4$$

ni = coordinació = 4 y 12

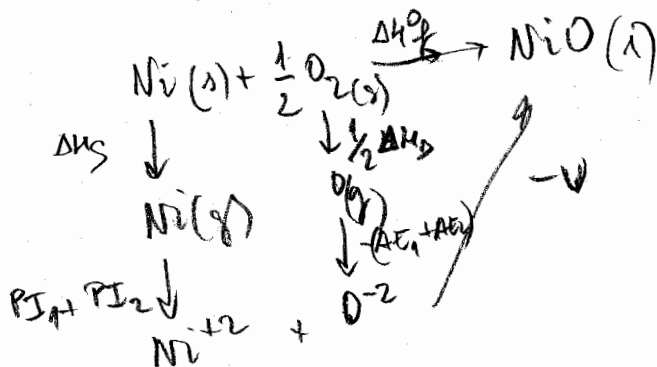
diagonal de la cara.

a = ① ② ③ $2r_{Ni} + 2 = a = 2.5$

② $a^2 = 2a^2$
 $\frac{12.5}{4.42} = 3.535 = a$

③ $V = \frac{4 \cdot 42 \cdot 10^{-29} - \frac{16}{3} \pi r^3}{4.42 \cdot 10^{-29}} \rightarrow V_{TOTAL} = 20.2596 \approx 26\%$

$\rho = \frac{Z \cdot P_m}{N_A \cdot V} = \frac{4 \cdot 58.7}{6.02 \cdot 10^{23} \cdot (3.535 \cdot 10^{-8})^3} = 883 \text{ g/cm}^3$



$\Delta H_f^\circ = \Delta H_s + (P_1 + P_2) + \frac{1}{2} \Delta H_D - (AE_1 + AE_2) - U$

$U = \Delta H_s + (P_1 + P_2) + \frac{1}{2} \Delta H_D - (AE_1 + AE_2) + \Delta H_f^\circ$

3.- Una partícula quàntica de massa m es mou dins d'una caixa unidimensional de longitud a i té una energia de $2h^2/ma^2$. Contesteu les següents qüestions:

- Per a quins valors de a la probabilitat de trobar la partícula és màxima i per a quins és nul·la.
- Com varia l'energia de la partícula si la seva massa es fa el doble.
- Quina és la diferència d'energia entre la de l'estat actual de la partícula i la del seu estat fonamental.
- Quina és la freqüència de la radiació capaç d'excitar la partícula des de l'estat fonamental fins l'actual.
- En l'estat en que es troba, quina és la probabilitat de trobar la partícula en els intervals:

- entre $a/2$ i a ; $\Rightarrow 1/2$
- entre $a/2$ i $5a/3$; $\Rightarrow 1/2$

Nota: L'energia de la partícula en un pou de potencial unidimensional és $E_n = n^2 h^2 / 8ma^2$

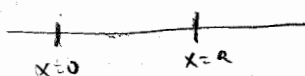
$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

$$n=4$$

$$\frac{n^2}{8} = 2$$

$$n=4$$

$$n-1 = 4-1 = 3 \text{ nodes}$$



$$\left(\frac{2h^2}{ma^2} \right)^2$$

$$\psi^2 =$$

$$\frac{4h^4}{m^2 a^4}$$

$$- 4m^2 a^3 \cdot 4h^4 = 0$$

$$16m^2 a^3$$

$$\psi_n = \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

$$\rightarrow n=4 \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \right)^{1/2} \sin \frac{4\pi}{a} x$$

$$\sin \frac{4\pi}{a} x \rightarrow \frac{4\pi}{a} x = m\pi$$

$$x = \frac{a}{4} m$$

$$m = 0, 1, 2, 3, 4$$

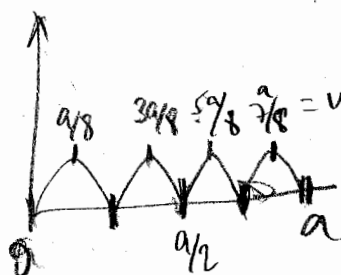
$$m=0 \quad x=0$$

$$m=1 \quad x=a/4$$

$$m=2 \quad x=a/2$$

$$m=3 \quad x=3a/4$$

$$m=4 \quad x=a$$



$$\sin x = 0$$

$$x = 0, \pi, 2\pi, \dots$$

$$b) E = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

energia a la unitat

$$c) n=4 \rightarrow n=1$$

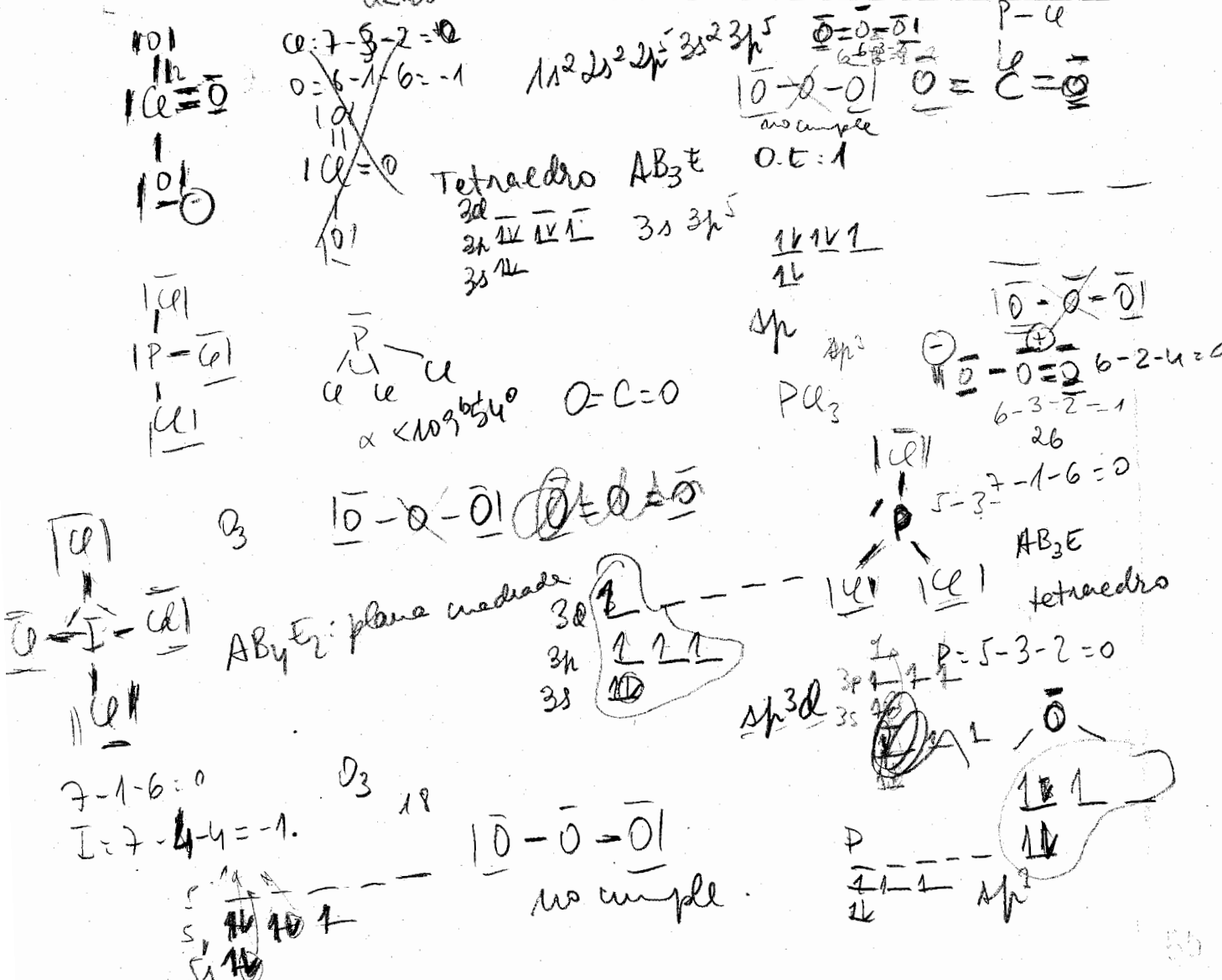
$$\Delta E = E_4 - E_1 = \frac{2h^2}{ma^2} - \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{15h^2}{8ma^2}$$

$$\frac{15h^2}{8ma^2}$$

$$d) E = h\nu \quad \nu = \frac{E}{h} = \frac{15h^2}{8ma^2 h} = \frac{15h}{8ma^2}$$

4.- Dibuixeu les estructures de Lewis més probables per a les molècules indicades en la primera columna de la taula i completeu la resta de la taula sempre que sigui possible.

Molècula	Geometria	Ordre d'enllaç	Càrrega	Híbrids de l'àtom central	Moment dipolar (Si/No)
ClO_3^-	tetraedro $\alpha < 109.5^\circ$	Cl-O: $1\frac{2}{3}$ 5/3	Cl: 0 O: $-1/3$	sp^3	no?
ICl_4^+	plana cuadrada	I-Cl: 1	I: 0 Cl: $-1/4$	sp^3	no
PCl_3	tetraedro $\alpha < 109.5^\circ$	P-Cl: 1	P: 0 Cl: 0	sp^3 inhibida	si
CO_2	plana	C-O: 2	C: $4-4=0$ O: $6-2-4=0$	sp	no
O_3	plana triangular $\alpha < 120^\circ$	O-O: $1\frac{1}{2}$	O(terminal): $1/2$ O(central): $+1$	sp^2	no?

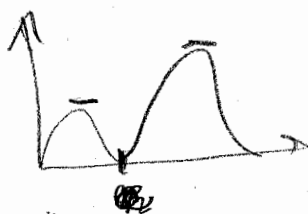
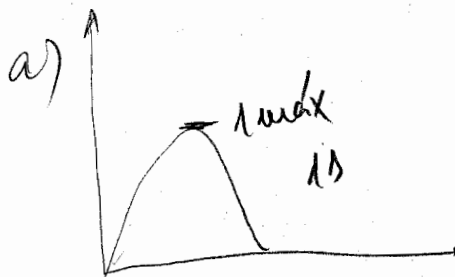


5.- Contesteu breument les següents qüestions:

- Dibuixeu de manera aproximada i en la mateixa gràfica la funció de distribució radial dels orbitals 1s, 2s i 3s i digueu quants nodes té cada una d'aquestes funcions.
- Expliqueu quina és la diferència entre l'ordenació de l'energia dels orbitals dels ions hidrogenoïdes i la dels àtoms polieletrònics.
- Calculeu el potencial d'ionització de l'ió He^+ en el seu primer estat excitat. (He : $Z=2$; $R_y=13.6 \text{ eV}$).
- Sabent que la funció 1s d'un ió hidrogenoïde de càrrega nuclear Z és:

$$\Psi_{1s} = 2 \sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} e^{(-Zr/a_0)} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Trobeu el màxim de la funció de distribució radial.



2 màxims
1 nodes

3 màx
2 nodes

$n \quad l \quad m$
1s 2s 3s
 $n-l-1 = \text{nodes}$

ordenació de la energia
 $\text{He}^+ = E_0 \cdot \frac{Z^2}{n^2} = 13.6 \cdot \frac{1}{4}$

c) $E = E_0 \cdot \frac{Z^2}{n^2} = 13.6 \cdot \frac{2^2}{2^2} = 13.6 \text{ eV}$

$E = E_0 \frac{Z^2}{n^2} \Rightarrow E = E_0 \frac{Z^2}{n^2}$

b?

d) $\Psi_{1s} = 2 \sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} e^{(-Zr/a_0)} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$4\pi r^2 \cdot \left(4 \frac{Z^3}{a_0^3} \cdot e^{-2Zr/a_0} \cdot \frac{1}{4\pi} \right) \Rightarrow \frac{4\pi Z^3}{a_0^3} \cdot e^{-2Zr/a_0}$

$\frac{8\pi Z^3}{a_0^3} \cdot e^{-2Zr/a_0} + \frac{4\pi Z^3}{a_0^3} \cdot \left(\frac{-2Z}{a_0} \right) \cdot e^{-2Zr/a_0}$

$\frac{8\pi Z^3}{a_0^3} \cdot e^{-2Zr/a_0} \left(\frac{1-2Z}{a_0} \right) = 0$
 $\frac{8\pi Z^2}{a_0^3} \cdot e^{-2Zr/a_0} \cdot (1-2Z) = 0$
 $(1-2Z) = 0 \Rightarrow 1-2Z = 0$
 $Z = \frac{a_0}{2}$