



OLIMPIADA NAȚIONALĂ DE CHIMIE BUZĂU, 28 aprilie-02 mai 2024 Ediția a LVII-a

Proba de baraj

Structură - Barem

Subiect _____ (15 puncte)

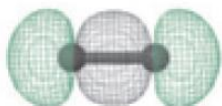
1. (A) $S > 0$; (B) $S < 0$; (C) $S = 0$; (D) $S < 0$; (E) $S = 0$ (5*0.2 p)

Dacă $S > 0$, atunci se formează un orbital molecular de legătură. (0.3 p)

Dacă $S < 0$, atunci se formează un orbital molecular de antilegătură. (0.3 p)

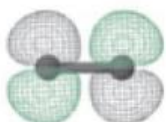
Dacă $S = 0$, atunci acoperirea nu este posibilă. (0.4 p)

2. (a) 0.5 p



HOMO pentru N_2^+
 $2p_z \sigma_g$ (0.25 p)

(c) 0.5 p



HOMO pentru O_2^-
 $2p_x \pi_g$ sau $2p_y \pi_g$ (0.25 p)

3. (a) 2 p

(b) 0.5 p

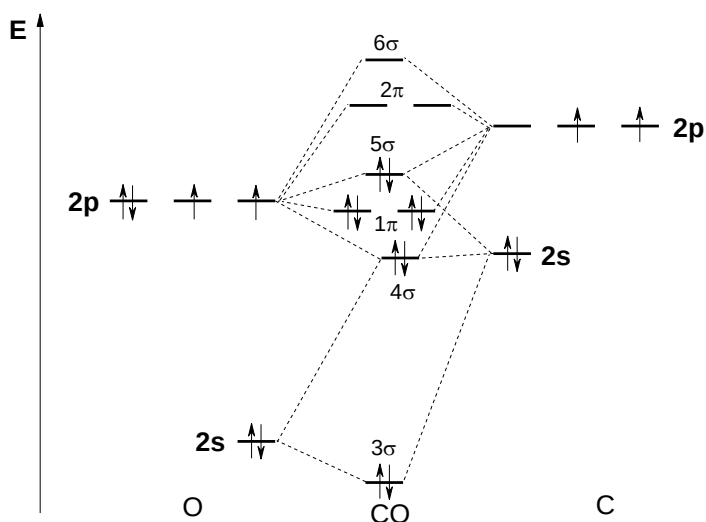


HOMO pentru B_2
 $2p_x \pi_u$ sau $2p_y \pi_u$ (0.25 p)

(d) 0.5 p

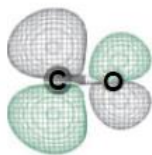


HOMO pentru H_2^-
 $1s \sigma_u$ (0.25 p)



(b) 1 p

LUMO: $2\pi^*$ este un orbital molecular de antilegătură (are plan nodal); este distribuit mai mult pe



carbon decât pe oxigen deoarece orbitalul atomic al carbonului este mai apropiat energetic de $2\pi^*$ (răspunzătoare de acest comportament este diferența de electronegativitate dintre O și C)

(c)

$I=14$ eV; $\text{CO}^+ (3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^4(5\sigma)^1$; electronul este îndepărtat dintr-un OM de nelegătură (frecvența de vibrație nu se modifica față de cea a CO) **(0.5 p)**

$I=16,5$ eV; $\text{CO}^+ (3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^3(5\sigma)^2$; electronul este îndepărtat dintr-un OM de legătură (frecvența de vibrație scade față de cea a CO) **(0.5 p)**

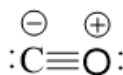
$I=19,7$ eV; $\text{CO}^+ (3\sigma)^2(4\sigma)^1(1\pi)^4(5\sigma)^2$; electronul este îndepărtat dintr-un OM de legătură (frecvența de vibrație scade față de cea a CO) **(0.5 p)**

$E_{\text{HOMO}} = -14$ eV **(0.5 p)**

Spectrul fotoelectronic nu da informații despre E_{LUMO} (nu există electroni în LUMO care să fie îndepărtați din moleculă; putem spune cel mult $E_{\text{LUMO}} > -14$ eV). **(0.5 p)**

(d)

Structura Lewis **(0.5 p)**:



Legătura sigma corespunde electronilor din OM 4σ . **(0.5 p)**

Legăturile pi corespund electronilor din cei doi OM 1π . **(0.5 p)**

Electronii neparticipanți de pe C corespund electronilor din OM 5σ . (vezi atribuirea de mai sus) **(0.5 p)**

Electronii neparticipanți de pe O corespund electronilor din OM 3σ . **(0.5 p)**

(e)

Ordinul de legătură nu se modifică. **(0.25 p + 0.25 p explicația)**

Frecvența nu se modifică. **(0.25 p + 0.25 p explicația)**

Energia de disociere se modifică. **(0.25 p + 0.25 p explicația)**

Energia de disociere D_e nu se modifică. **(0.25 p + 0.25 p explicația)**