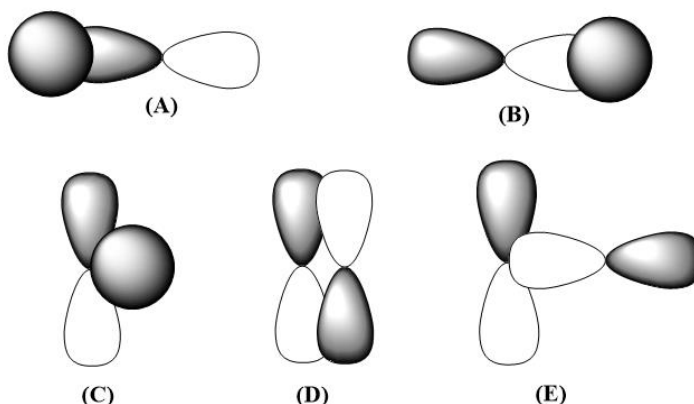


1 mai 2024, Buzău

Proba de baraj - STRUCTURĂ

1. (2 puncte) Se consideră o moleculă diatomică. Pentru fiecare dintre cazurile (A)-(E) date mai jos **indicați** dacă integrala de acoperire (notată S) a celor doi orbitali atomici este pozitivă, negativă sau zero. **Precizați** care este semnificația fizică pentru $S < 0$, $S > 0$ și respectiv $S = 0$.

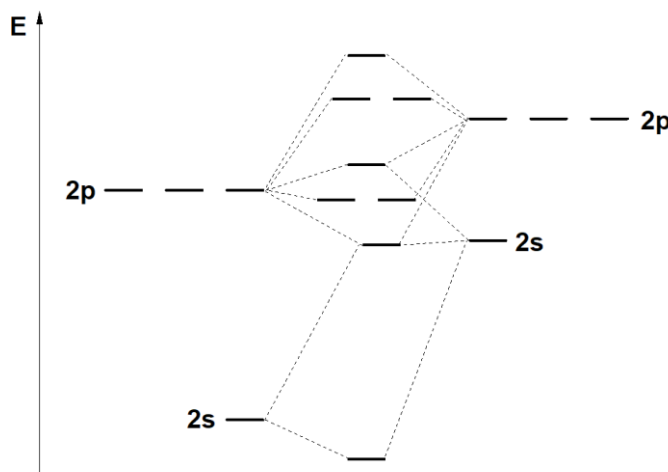


2. (3 puncte) **Desenați** și **denumiți** orbitalul molecular HOMO pentru următoarele specii:

a) N_2^+ ; b) B_2 ; c) O_2^- ; d) H_2^- .

3. Se consideră molecula diatomică de monoxid de carbon.

a) (2 puncte) Scrieți pe foaia de concurs diagrama de orbitali moleculari ai monoxidului de carbon prezentată mai jos și **completați**-o cu numele orbitalilor moleculari și electroni.



b) (1 punct) **Desenați** orbitalul molecular LUMO al monoxidului de carbon. **Explicați** forma acestuia.

Natura orbitalilor moleculari (lianți, antilianți sau de nelegătură), precum și energiile lor pot fi aflate experimental cu ajutorul spectroscopiei fotoelectronice. Spectroscopia fotoelectronică constă în iradierea unei probe cu energie mare (UV pentru electronii de valență sau raze X pentru electronii din straturile interioare) și analiza energiei cinetice a electronilor îndepărtați. Deoarece energia se conservă, energia fotonului incident $h\nu$ trebuie să fie egală cu energia de ionizare (I) a moleculei și energia cinetică a electronului expulzat:

$$h\nu = \frac{mv^2}{2} + I$$

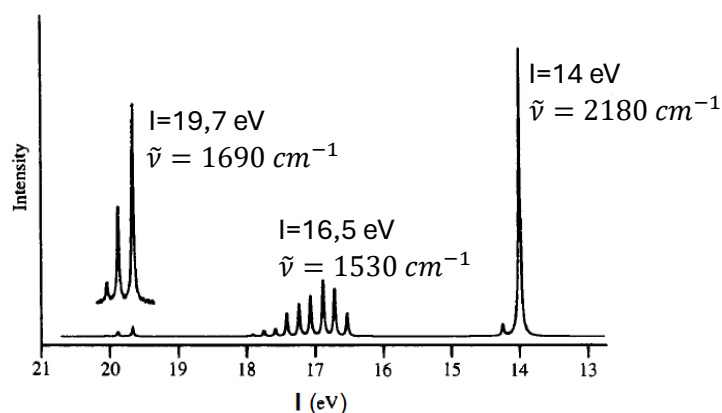
Spectrul fotoelectronic constă în benzi a căror poziție indică energia de ionizare. Dacă o bandă nu prezintă structură fină de vibrație ea corespunde ionizării unui orbital molecular de nelegătură. Orbitalii moleculari de legătură și cei de antilegătură au structură fină. Distanța dintre picuri permite aflarea frecvenței de vibrație a legăturii.

Frecvența de vibrație este dată de relația:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

unde k reprezintă constanta de forță și μ masa redusă. Frecvența de vibrație a CO este 2180 cm^{-1} .

(c) (2.5 puncte) Identificați căror specii le corespund benzile din spectrul fotoelectronic UV al CO dat mai jos. **Scrieți** configurația electronică pentru fiecare specie. **Justificați** răspunsul. **Care este** valoarea energiei orbitalului HOMO în CO? Dar a lui LUMO?



d) (2.5 puncte) Scrieți structura Lewis pentru CO și **corelați-o**, acolo unde este posibil, cu diagrama de orbitali moleculari.

Indicație: Puteți redacta răspunsul sub forma: perechea de electroni sigma din formula Lewis corespunde electronilor din orbitalul molecular...; similar și pentru ceilalți electroni.

e) (2 puncte) Care din următoarele mărimi se modifică dacă în loc de ^{12}CO avem ^{14}CO : **ordinul de legătură, frecvența de vibrație, energia de disociere D_0 , energia de disociere D_e** ? **Explicați.** Semnificația energiilor de disociere D_0 și D_e este dată în figura de mai jos.

Indicație: Puteți folosi formule de definiție etc pentru a răspunde, dar nu sunt necesare calcule numerice.

