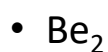


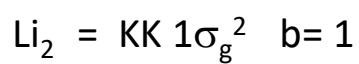
Esercizi

1

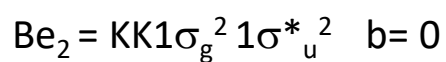
- Indicare la configurazione elettronica dello stato fondamentale e l'ordine di legame per:



$\text{Li} = 3 \text{ (K} + 1e^- \text{ per formare il legame)}$



$\text{Be} = 4 \text{ (K} + 2e^-)$



2

- Indicare la configurazione elettronica e l'ordine di legame
- H_2^-

3 elettroni

$$1\sigma^2 2\sigma^{*1} \quad b = 0.5$$

3

- Valutare nei seguenti casi se aggiungendo (AB^-) o rimuovendo un elettrone (AB^+) aumentiamo o diminuiamo l'ordine di legame
- N_2 O_2

- Dobbiamo valutare se l'elettrone aggiunto o rimosso proviene da un orbitale di legame o antilegame.

$$N_2: KK(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(1\pi_u)^4(2\sigma_g)^2 \quad b = 3$$

$$AB^- \quad 2\pi^{*1} \quad (-1/2) \quad b = (8-3)/2 \quad AB^+ \quad 2\sigma_g^1 \quad (-1/2) \quad b = (7-2)/2$$

$$O_2 \quad KK(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(1\pi_u)^4(1\pi_g^*)^2 \quad b = 2$$

$$AB^- \quad 1\pi_g^{*3} \quad (-1/2) \quad b = (8-5)/2 \quad AB^+ \quad 1\pi_g^{*1} \quad (+1/2) \quad b = (8-3)/2$$

4

Valutare se N_2^+ debba avere energia di dissociazione maggiore o minore di N_2

- La molecola con maggiore ordine di legame avrà maggiore D_0 in quanto il legame sarà più stabile
- $N_2 = (1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(1\pi_u)^4(2\sigma_g)^2$ $b = 3$
- $N_2^+ = (1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(1\pi_u)^4(2\sigma_g)^1$ $b = 2,5$

$$D_0(N_2) = 945 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$D_0(N_2^+) = 842 \text{ kJmol}^{-1}$$

5

1. Scrivere la configurazione elettronica dell'atomo di azoto, senza considerare la sua ibridazione e riportare in un diagramma di energia gli orbitali molecolari che ottieni nella formazione della molecola di N_2
- 2) Se consideri l'azoto ibridato, cosa cambia nella formazione degli orbitali molecolari della molecola di N_2 ?

6

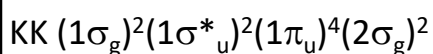
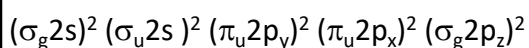
Regole per l'ibridazione:

- 1) Gli orbitali atomici per combinarsi devono essere energeticamente simili fra loro: l'ibridazione riguarda solo gli orbitali dello stesso livello energetico, ovvero con lo stesso numero quantico principale.
- 2) l'ibridazione degli orbitali atomici si considera quando si deve formare un legame chimico, e non atomi a sé stanti in forma non legata.
- 3) Gli orbitali atomici di partenza sono sostituiti da un numero di orbitali "ibridi" uguale a quello degli orbitali che si sono combinati.
- 4) Gli orbitali ibridi hanno fra loro identica energia, intermedia rispetto a quella degli orbitali atomici che si sono fra loro combinati, ed identica forma.
- 5) Uno o più orbitali ibridi possono essere occupati da doppietti elettronici invece di partecipare attivamente ai legami molecolari.
- 7) L'ibridazione non è un fenomeno fisico ma una combinazione matematica... tra le funzioni d'onda che descrivono gli orbitali. E' di uno dei "metodi migliori attualmente disponibili" per rendere conto della direzionalità dei legami chimici e quindi della struttura delle molecole.

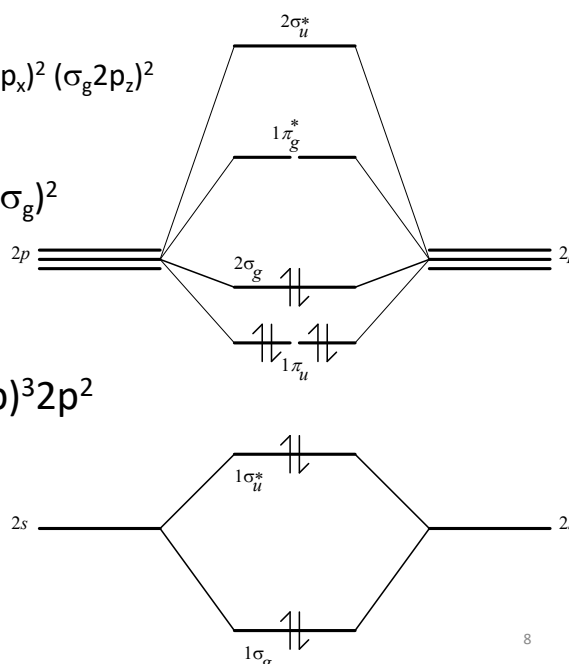
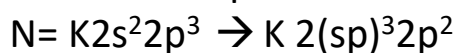
7

La molecola di azoto N₂

Configurazione



Ibridazione sp



8

Mettere le molecole O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} in ordine decrescente di ordine di legame

O_2^+ (11 e^-)

$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(1\pi_u)^4(1\pi_g^*)^1$ $b=2.5$

O_2 (12 e^-)

$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(1\pi_u)^4(1\pi_g^*)^2$ $b=2$

O_2^- (13 e^-)

$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(1\pi_u)^4(1\pi_g^*)^3$ $b=1.5$

O_2^{2-} (14 e^-)

$(1\sigma_g)^2(1\sigma_u^*)^2(2\sigma_g)^2(1\pi_u)^4(1\pi_g^*)^4$ $b=1$

Ogni elettrone va in un orbitale di antilegame.



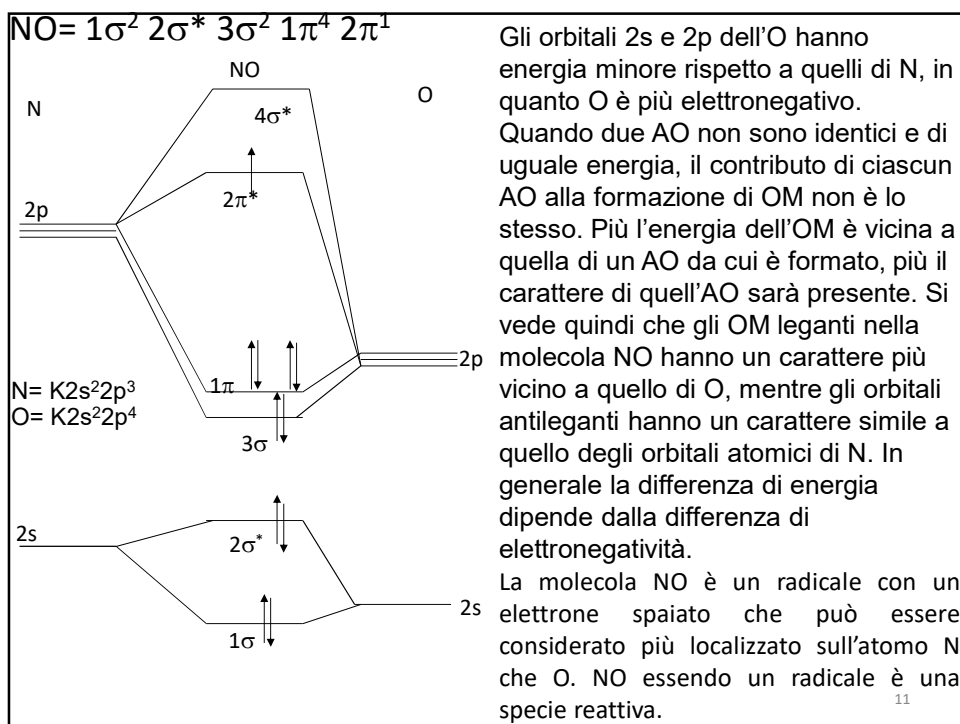
- Scrivere il diagramma dei livelli di energia degli orbitali molecolari della molecola

- NO

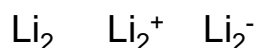
- N= $K2s^22p^3$

- O= $K2s^22p^4$

La molecola possiede 11 elettroni



Configurazione elettronica ed ordine di legame di



$$\text{Li}_2 = (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^2 \quad b = 1$$

$$\text{Li}_2^+ = (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^1 \quad b = 1/2$$

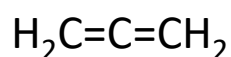
$$\text{Li}_2^- = (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u^*)^2 (2\sigma_g)^2 (2\sigma_u)^1 \quad b = 1/2$$

L'ordine di stabilità è $\text{Li}_2^- = \text{Li}_2^+ < \text{Li}_2$

In realtà Li_2^+ è più stabile di Li_2^- poiché c'è minore repulsione elettrostatica

12

- Discutere la struttura dell'allene in termini della geometria dei legami ed ibridazione degli orbitali. I tre atomi di Carbonio sono colineari

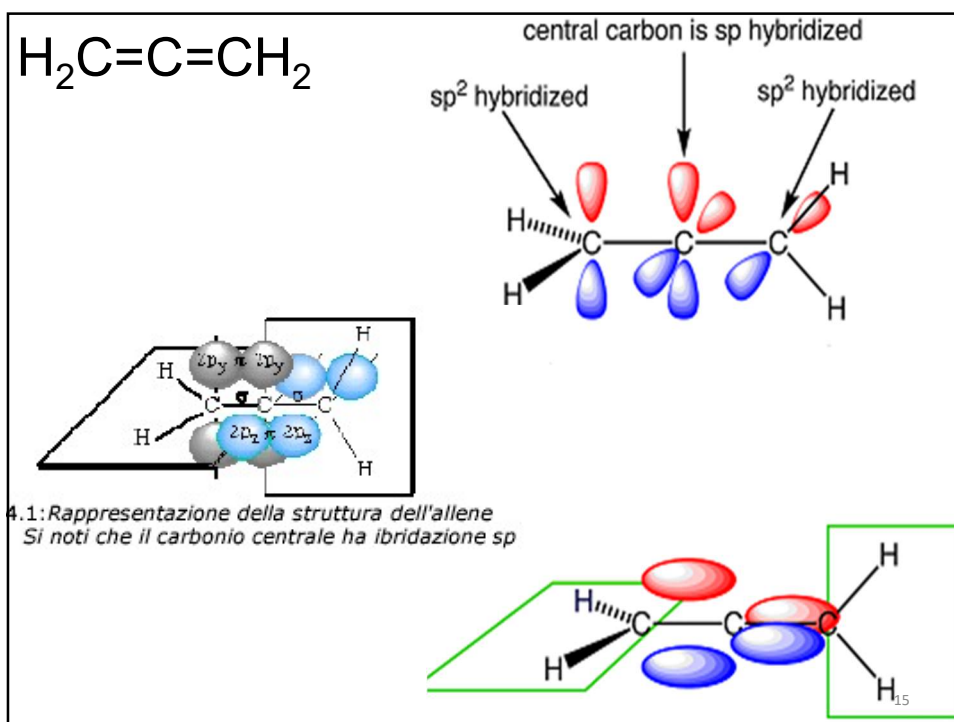


13

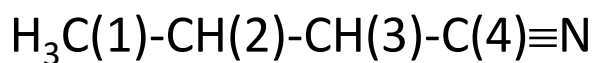
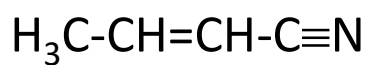
- $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$.

I due atomi di carbonio terminali sono legati a due atomi di idrogeno e all'atomo di carbonio centrale e sono ibridati sp_2 con angoli di legame di 120° . L'atomo di carbonio centrale è legato con doppi legami agli altri due atomi di carbonio e forma due legami σ utilizzando orbitali ibridi sp disposti secondo angoli di 180° . L'atomo di carbonio centrale ha così a disposizione due orbitali p per formare due legami π : uno di questi due può sovrapporsi all'orbitale $2p_y$ di uno dei due atomi di carbonio esterni per formare un legame π e l'altro si sovrappone all'orbitale $2p_z$ dell'altro atomo di carbonio in un piano perpendicolare al primo:

14



Trovare l'ibridazione e gli angoli di legame dei carboni per la seguente molecola

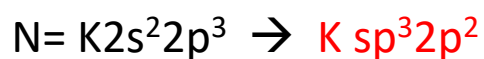
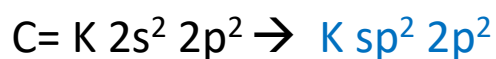


C(1) : sp³ tetraedrico (109.5°)

C(2) e C(3) : sp² 120°

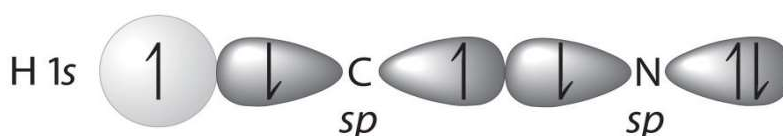
C(4) sp 180° lineare

- Descrivere i legami in HCN usando combinazioni di orbitali ibridi per formare gli orbitali molecolari.
- La molecola HCN è lineare.
- Poiché HCN è lineare i legami σ saranno formati da orbitali ibridi sp sia su C che su N.



17

- $sp(\text{C}) + sp(\text{N})$ σ legame C–N
- Rimane un orbitale ibrido su ciascun atomo
 $sp(\text{C}) + \text{orbitale } s(\text{H})$ σ di legame C–H
 L'altro su N forma un orbitale di non legame (N).
 Dei 10 elettroni di valenza (5 di N, 4 di C, e 1 from H)
 4 sono adoperati per i legami σ



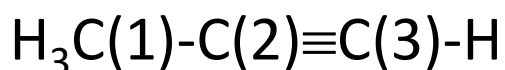
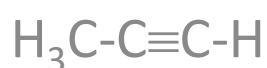
18

Rimangono

- 2 elettroni su N (5 elettroni di valenza meno 1 elettrone di legame, 2 elettroni che formano il doppietto)
- 2 elettroni su C (4 elettroni di valenza meno 2 elettroni per i legami).
- Ci sono due orbitali 2p non ibridi sia su N che su C, ciascuno con 1 elettrone. Questi 4 orbitali atomici 2p possono combinarsi per dare 4 OM: 2 π (legame) e π^* (antilegame)
- **Dato che si sono solo 4 elettroni solo gli orbitali π sono pieni.**
- Quindi si ottiene un triplo legame (1 σ e 2 π) tra C e N.

19

Trovare l'ibridazione e gli angoli di legame dei carboni per la seguente molecola



C(1) : sp^3 tetraedrico (109.5°)

C(2) e C(3) : sp 180° lineare

20