

Esercitazione 4 - Squadra 1 (Chimica e Materiali) 09/10/2020

4.1 Uno ione H^+ caccia un elettrone libero ed emette un fotone a 820 nm. A quale livello si trova l'elettrone subito dopo questo processo?

Si prende ancora la formula di Rydberg

$$\lambda = cR \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Sappiamo che e^- è libero quindi $n_2 \approx \infty$ (Approssimazione)

→ vogliamo sapere il livello dopo l'assorbimento $\Rightarrow n_1$

$$\hookrightarrow \frac{\lambda}{cR} = \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \quad (n_2 \approx \infty \hookrightarrow \frac{1}{n_2^2} = 0)$$

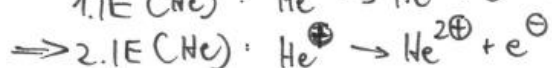
$$\hookrightarrow n_1 = \sqrt{\frac{cR}{\lambda}} = \sqrt{\frac{c}{\lambda} \cdot R} \quad (\lambda = \frac{c}{\nu})$$

$$n_1 = \sqrt{\lambda R} \quad (\lambda = 820 \text{ nm} = 820 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

$$= \sqrt{8,2 \cdot 10^{-7} \text{ m} \cdot 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}} = \underline{\underline{3}}$$

4.2 Calcolare in eV l'energia di seconda ionizzazione di He.

) Energia d'ionizzazione (IE)



↳ Sistema con un elettrone
quindi possiamo usare
ancora la formula

$$\text{sapendo che } \lambda = cR \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

deriva dall'energia totale per i livelli

$$E_n = - \frac{(Z^2 e^4 m_e)}{8 \epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

quindi $E \sim Z^2$ (carica del nucleo, per He $Z=2$)

quindi possiamo usare la formula

col fattore 4

$$\hookrightarrow \gamma_{He} = 4hcR \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\Delta E = |E_2| = h\gamma = 4hcR \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\left. \begin{array}{l} n_1 = 1 \\ n_2 = \infty \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{processo dell'ionizzazione} \\ \text{sempre stato fondamentale} \end{array}$$

$$\Delta E = 4hcR = 4 \cdot 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}$$

$$= 8,722 \cdot 10^{-18} \text{ J} \quad * 1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\hookrightarrow 1 \text{ J} = \frac{1}{1,602} \cdot 10^{19} \text{ eV}$$

$$= 8,722 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot \frac{1}{1,602} \cdot 10^{19} \frac{\text{eV}}{\text{J}}$$

$$= \underline{\underline{54,4 \text{ eV}}} \quad \hat{=} \quad 4 \times \text{energia dello stato} \\ \text{fondamentale per H!}$$

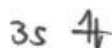
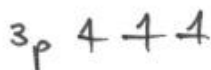
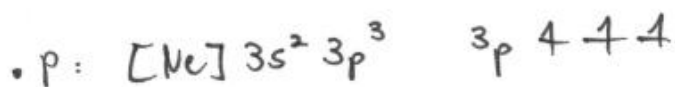
4.3 Scrivere la configurazione elettronica delle seguenti specie: P, O²⁻, K⁺, Mn, Ca⁺, Hf. Quanti elettroni appaiati ci sono nel livello occupato a maggior energia di ognuna delle specie? Avranno spin uguale o opposto?

Costruire correttamente configurazioni:

a) Pauli (esclusione) = 2e⁻ al max. Spin opposto/orbitale

b) Hund (regola) = orbitali degeneri e⁻ inizialmente
Singolari con spin parallelo

c) energia degli orbitali 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, ..., 4p
(tavola periodica) 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, ...

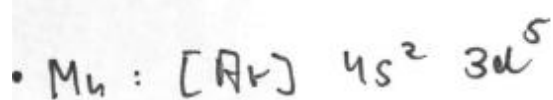
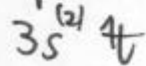
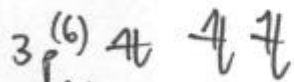
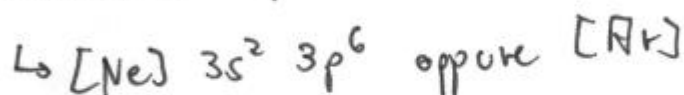
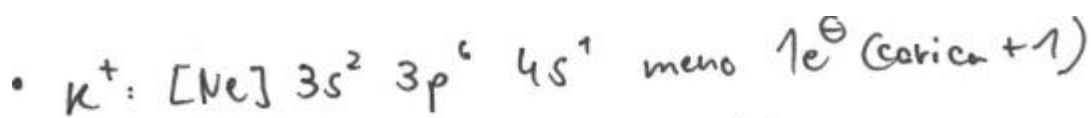
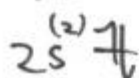
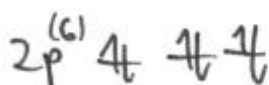
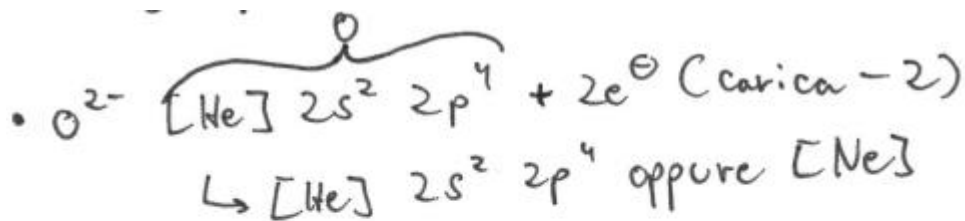
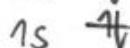
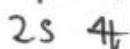
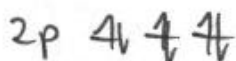


(basta 6 elettroni
di valenza)

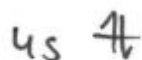
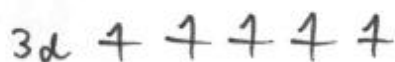


Configurazione di Ne

abbreviazione:



↪ $E(3d) > E(4s)$!



• Ca^+ : $[\text{Ar}] 4s^2$ meno $1e^-$ (carica +1)

↳ $[\text{Ar}] 4s^1$

4s ↑

• Hf : $[\text{Xe}] 6s^2 4f^{14} 5d^2$ $E(6s) < E(4f) < E(5d)!$

5d ↑ ↑ ---

4f ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

6s ↑

4.4 A quale elemento corrisponde la configurazione elettronica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$? Quali sono gli ioni stabili ad esso isoelettronici con carica +1, +3, -1?

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

↳ $[\text{Ne}]$

↳ più di $2e^-$

↳ Secondo gruppo

↳ Mg^0

Carica +1 → Al^+

+3 → P^{3+}

-1 → Na^-

4.5 L'affinità elettronica del litio è positiva mentre quella del berillio è negativa. Giustificare tale differenza.

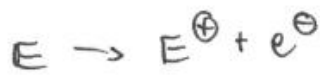
R. L'affinità elettronica (AI) è correlata all'energia per l'acquisto un elettrone da parte di un atomo neutro gassoso:



Pur essendo influenzata dalla carica nucleare efficace dell'atomo e dal suo raggio, gli effetti di configurazione elettronica sono decisivi. Nel caso considerato si ha che per il litio, avente configurazione elettronica $[\text{He}]2s^1$, l'elettrone aggiuntivo si dispone nell'orbitale $2s$ che risulta semioccupato; al contrario, per il berillio ($[\text{He}]2s^2$) l'elettrone deve porsi nell'orbitale $2p$ e avrà quindi energia maggiore, risentendo meno dell'attrazione da parte del nucleo. L'anione Li^- risulta più stabilizzato rispetto a Be^- .

4.6 Ordinare le energie di ionizzazione per le seguenti coppie: He/H, O/N.

L'energia di ionizzazione



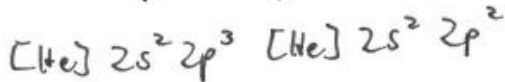
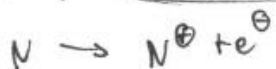
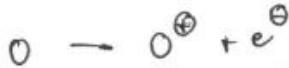
• He/H:



ma He ha una configurazione elettronica molto stabile

↳ quindi per togliere un elettrone si deve investire più energia che per H

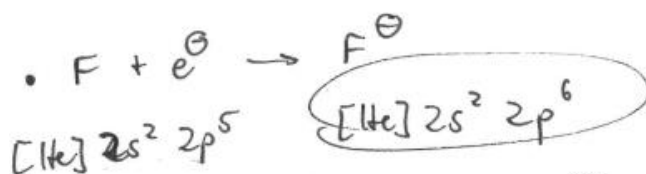
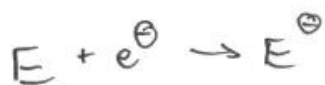
• O/N



ma anche gli orbitali semi-occupati sono stabile (anche se meno) tramite il processo dell'ionizzazione O raggiunge questa configur. mentre N la perde

4.7 Ordinare le affinità elettroniche per i seguenti elementi: F, He, Na, Mg.

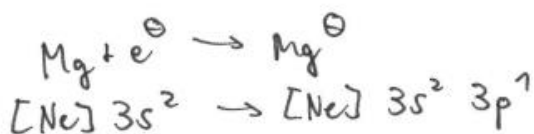
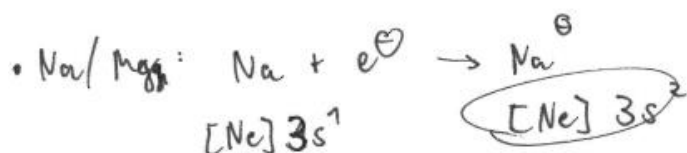
L'affinità elettronica AE



↳ F raggiunge
 la configurazione dei gas
 nobili che è molto stabile
 ↳ quindi si vince tanta energia
 $AE(F)$ max.



→ questa stabile configurazione
 viene persa nel caso dell'elio
 ↳ $AE(He)$ min.



Mentre Na vince una configurazione abbastanza
 stabile (pieno orbitale) Mg la perde

$$\rightarrow EA(Na) > EA(Mg)$$

Siccome questa configurazione è meno stabile
 (3s orbitale → solo sotto-livello)

$$\rightarrow EA(F) > EA(Na) > EA(Mg) > EA(He)$$

4.8 Determinare le strutture di Lewis per le seguenti molecole: CS_2 , H_3N , $\text{CO}(\text{CH}_3)_2$.

* CS_2 : Per disegnare la struttura LEWIS è necessario sapere la connessione (la struttura precisa per adesso non molto importante). Quindi, per CS_2 si deve sapere che C è nel centro (il fatto che la molecola è lineare non è importante per adesso):



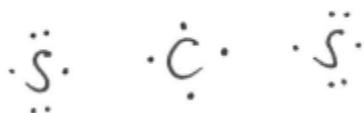
(linea tratteggiata per mostrare solo connessione = struttura scheletro)

Per ottenere il numero degli elettroni di valenza disponibili si prende la configurazione elettronica dell'atomo:

C: $[\text{He}] 2s^2 2p^2$ quindi 4

S: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$ quindi 6

Quindi senza fare legami gli elettroni sono distribuiti in questo modo:



Ogni atomo vuole completare l'ottetto elettronico mancano quindi

C: $[\text{He}] 2s^2 2p^2 \rightarrow [\text{He}] 2s^2 2p^6 = [\text{Ne}]$ **4 elettroni** (si può anche calcolare = $8 - 4$)

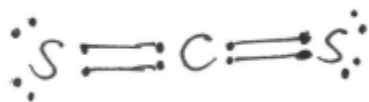
S: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4 \rightarrow [\text{Ne}] 3s^2 3p^6 = [\text{Ar}]$ **2 elettroni** ($= 8 - 6$)

Per completare gli atomi condividono i loro elettroni = fanno i legami covalenti. Fanno quindi

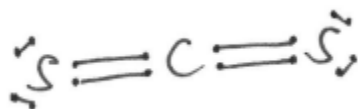
C: 4 legami

S: 2 legami

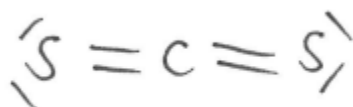
L'unico modo per farlo in questa molecola è



Per zolfo gli elettroni che rimangono fanno le copie singole



Quindi:



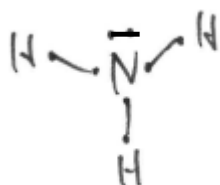
*NH₃: Anche se non sapessimo la connessione, potremmo ottenerla dalla considerazione che H fa solo un legame perché:

N: [He] 2s² 2p³ quindi 5 elettroni di valenza

Vuole ottetto -> [He] 2s² 2p⁶ = [Ne] mancano **3 elettroni** (si può anche calcolare = 8 - 5)

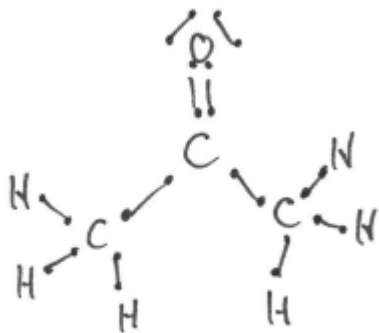
H: 1s¹ quindi 1 elettrone di valenza

Vuole ottetto -> 1s² = [He] manca **1 elettrone** (si può anche calcolare = 2 - 1)



* CO(CH₃)₂:

I gruppi CH₃ sono insieme, così possiamo ottenere la connessione:



oppure

