

Esercitazione 6 - Squadra 1 (Chimica e Materiali) 23/10/2020

6.1 Determinare la geometria dell'assetto elettronico e molecolare secondo la VSEPR delle seguenti specie:

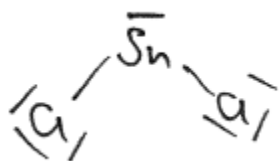
SnCl_2 , SF_6 , ClF_5 , XeF_4 , S_4 .

Ci sono siti per visualizzare le strutture molecolari:

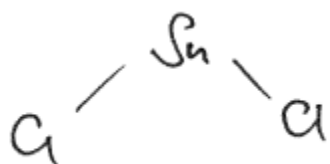
https://www.mn-am.com/online_demos/corina_demo_interactive

È essenziale avere la corretta struttura di Lewis:

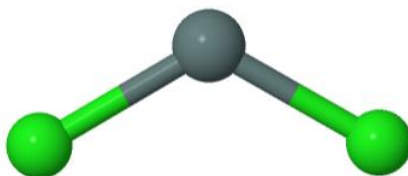
* SnCl_2 :



quindi AX_2E , quindi: Angolare



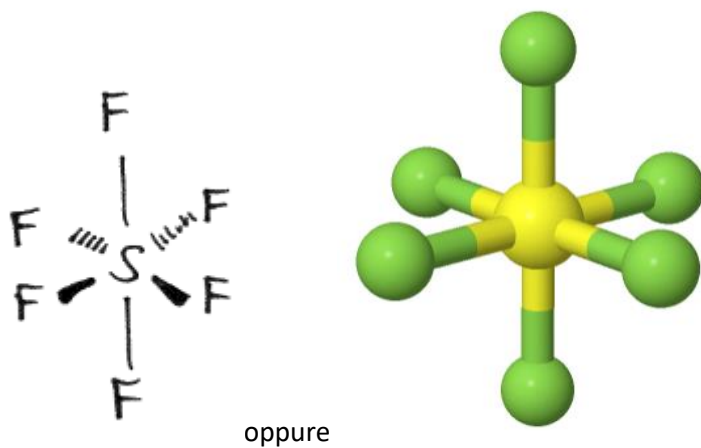
oppure



* SF_6 :

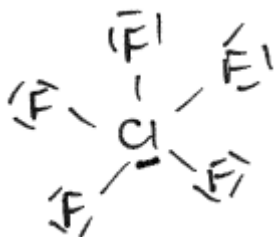


quindi AX_6 , quindi: Ottaedrico.

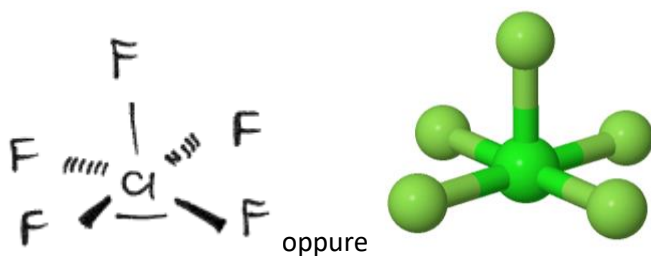


oppure

*ClF₅:

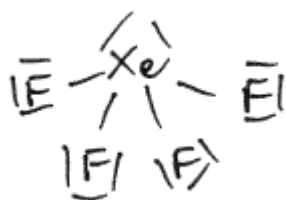


quindi AX₅E, quindi: Piramide a base quadrata (Sulla base dell'ottaedro va sostituito un legame covalente con coppia solitaria).

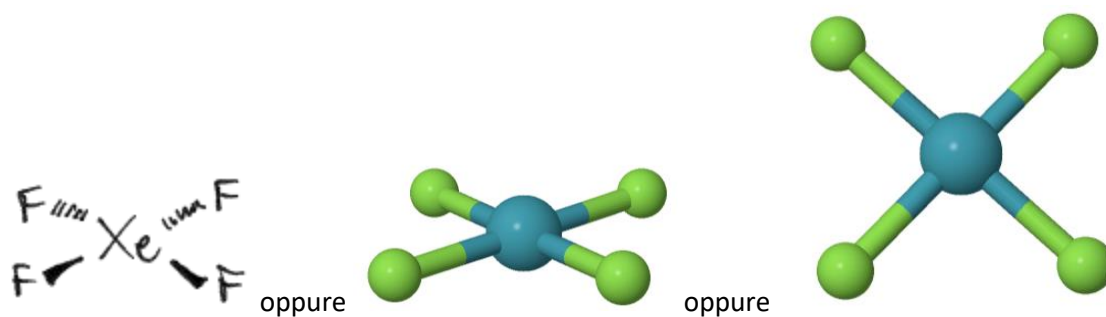


oppure

*XeF₄:

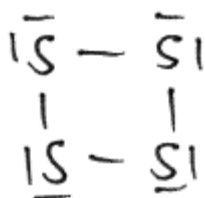


quindi AX₄E₂. Sulla base dell'ottaedro vanno sostituiti due legami covalenti con coppie solitarie. Per farlo ci sono due possibilità: Coppie solitarie di fianco oppure lontane. Siccome la repulsione tra coppie solitarie è più forte quindi lontane quindi planare quadrata.



*S₄:

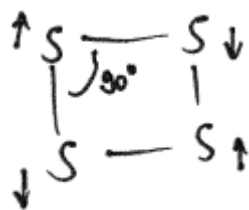
Dobbiamo considerare non solo un atomo ma tutti. La struttura di Lewis è



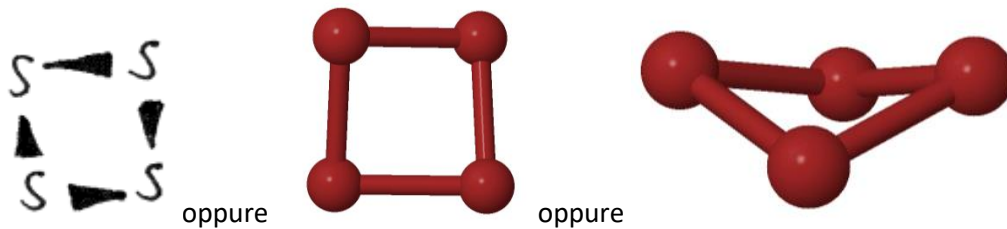
Quindi **ogni** zolfo ha AX₂E₂ quindi angolare. Visto che la struttura viene dal tetraedro l'angolo deve essere ca. 109°.



Se l'anello fosse planare, gli angoli sarebbero 90°. Per aumentare l'angolo gli zolfi vanno fuori il piano in alternanza (giù, su, giù, su)



È così tutto l'anello non planare.

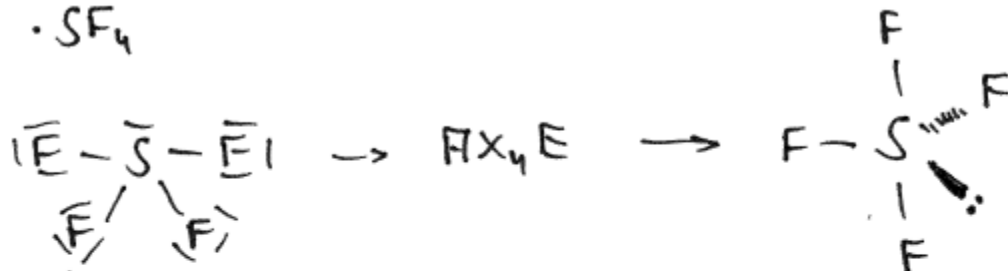


6.2 Determinare, usando VSEPR, quante specie di F sono in SF₆, SF₄, PF₃, PF₄⁻.

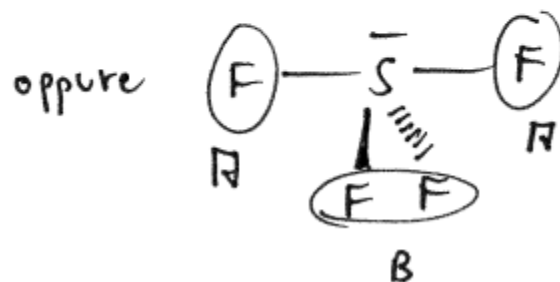
• SF_6 (cfr. G.1)

→ ottaedrico → tutti uguali → 1

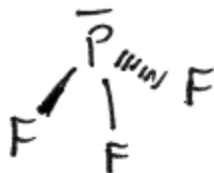
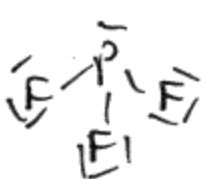
• SF_4



↳ due tipi → 2



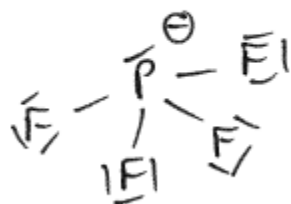
• PF_3



→ simmetrico

→ 1

PF_4^{\ominus}

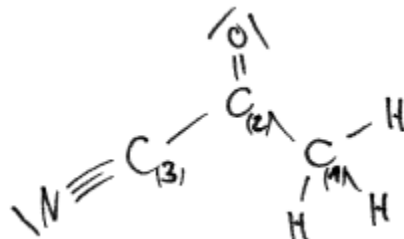


→ isoelettronico a SF_4

↳ 2

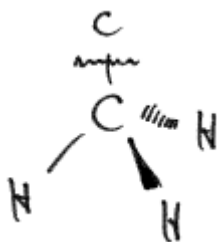
6.3 Considerando la seguente molecola: $NC-CO-CH_3$. Prevedere gli angoli di legame attorno a ciascun carbonio, la loro ibridazione e il numero e tipo dei legami presenti nella molecola.

Per prima cosa va individuata la struttura di Lewis della molecola:

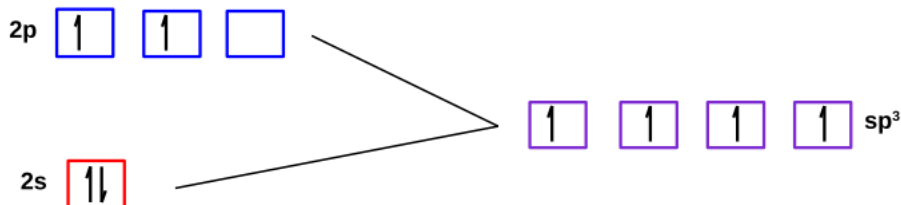


Ci sono tre carboni (numerato da noi C(1), C(2) e C(3)).

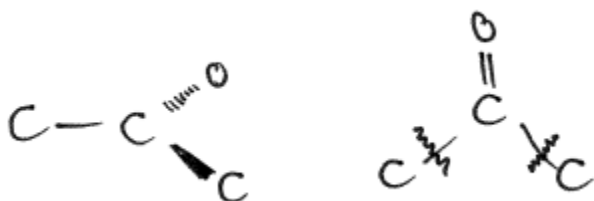
*C(1): Forma quattro legami singoli e dunque presenta quattro regioni ad alta densità elettronica attorno a sé. Queste si dispongono in modo da minimizzare la repulsione, dando luogo ad una geometria tetraedrica, con angoli di circa 109°:



Siccome ci sono quattro legami singoli, deve avere quattro elettroni spaiati in altrettanti orbitali quindi l'ibridizzazione sp^3 (figura seguente) dando quattro legami σ in cui gli elettroni si trovano lungo l'asse internucleare tra gli atomi coinvolti.

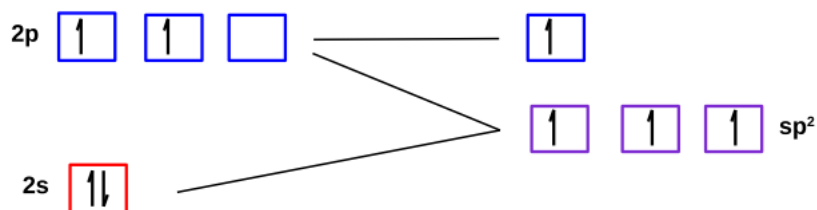


*C(2): Presenta due legami singoli con i carboni e un legame doppio con ossigeno. Quindi la geometria è trigonale planare:

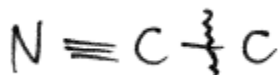


Siccome forma due legami singoli e uno doppio l'ibridizzazione è sp^2 , in cui l'orbitale 2s viene combinato con due orbitali 2p dando luogo a tre orbitali ibridi, mentre il restante orbitale p è coinvolto nella formazione del legame π

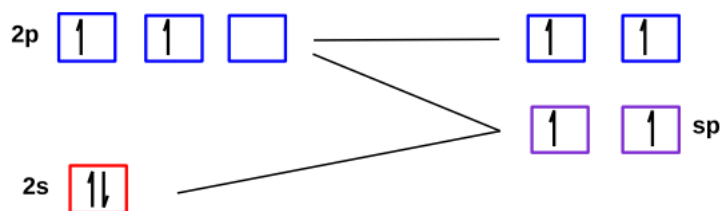
(figura seguente). Ci sono quindi tre legami σ e un legame π .



*C(3): Presenta un legame singolo con il carbonio e un triplo legame doppio con l'azoto. Quindi la geometria lineare:

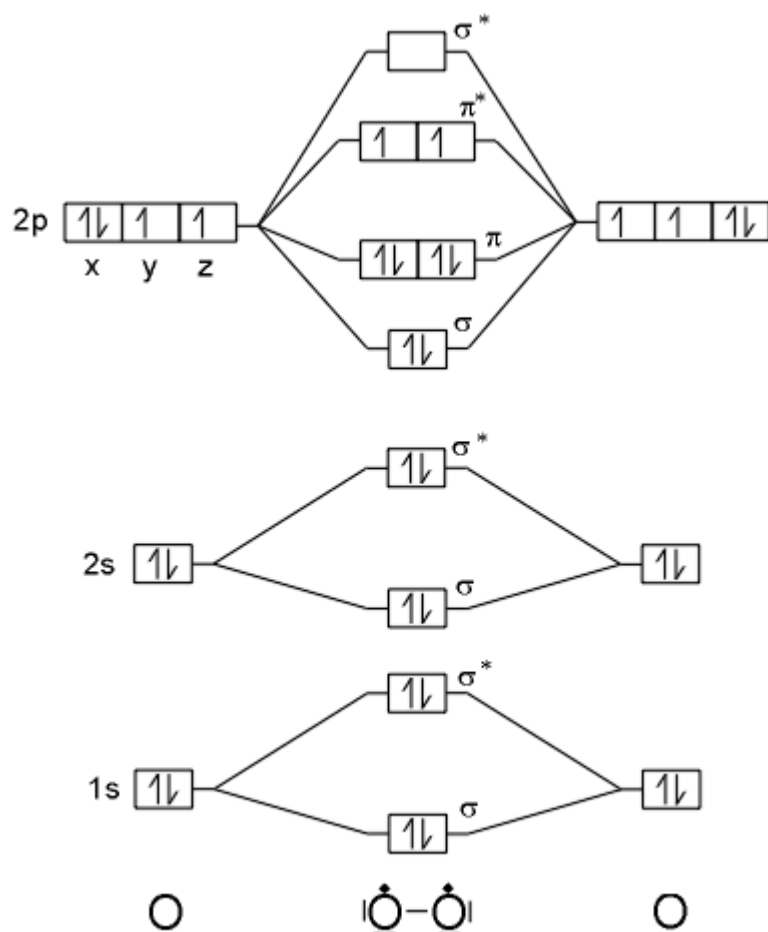


Poichè può esistere un solo legame σ tra due atomi, dei tre legami con azoto ce ne devono essere due di tipo π . Quindi l'ibridizzazione è sp: l'orbitale 2s si combina con uno degli orbitali 2p dando luogo a due orbitali ibridi sp coinvolti nei legami $\sigma(\text{C}-\text{C})$ e $\sigma(\text{C}-\text{N})$; i rimanenti orbitali 2p sono invece coinvolti nella formazione dei due legami π tra carbonio e azoto (figura seguente). In totale nella molecola ci sono quindi due legami σ e due legami π .



6.4 Disegnare i diagrammi degli orbitali molecolari per O_2 e O_2^{2-} e calcolare l'ordine di legame delle due molecole. Cosa si può dedurre riguardo la natura magnetica e la lunghezza del legame?

*O₂:



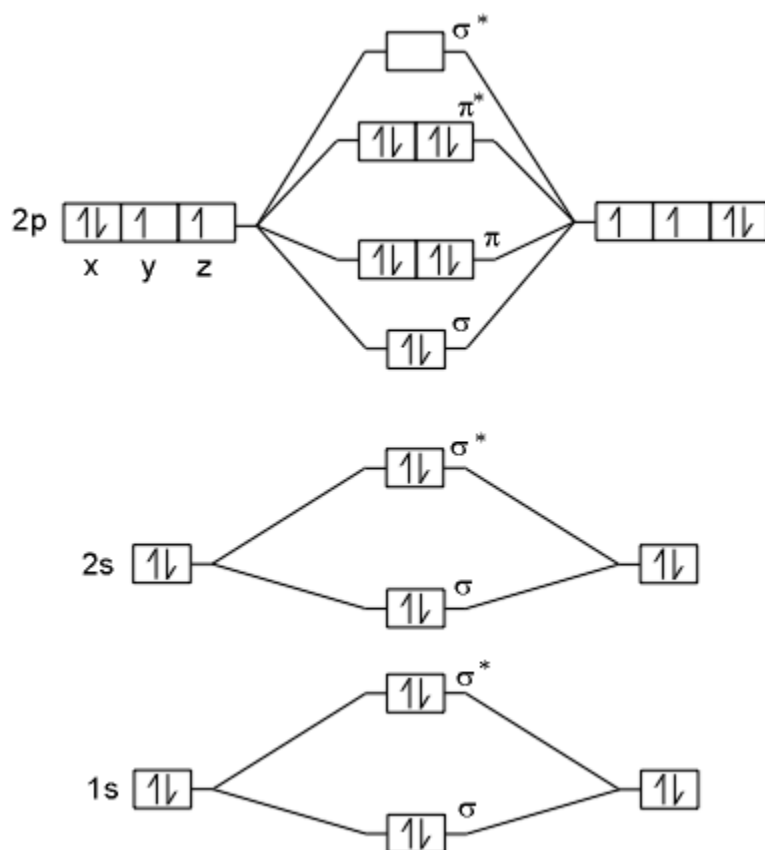
Siccome ci sono due elettroni spaiati la molecola è paramagnetico.

L'ordine di legame (BO) si può calcolare contando gli elettroni posti in orbitali molecolari leganti e sottraendo il numero di elettroni in orbitali non leganti:

$$BO = \frac{1}{2} [N(e^- \text{ bonding}) - N(e^- \text{ antibonding})] = \frac{1}{2} [6 - 2] = 2$$

Quindi un legame doppio tra i due ossigeni.

*O₂²⁻:



Siccome non ci sono elettroni spaiati la molecola è diamagnetico.

L'ordine di legame (BO):

$$BO = \frac{1}{2} [N(e^- \text{ leganti}) - N(e^- \text{ antileganti})] = \frac{1}{2} [6 - 4] = 1$$

Quindi un legame singolo tra i due ossigeni. Cioè il legame in totale è più debole e quindi la lunghezza del legame dovrebbe essere più grande.

6.5 Un cilindro da 20,0 l contiene 28,6 g di ossigeno gassoso. Sapendo che la temperatura è 125°C, calcolare la pressione esercitata dal gas sulle pareti del cilindro.

R. Si conoscono il volume, la temperatura e la quantità di gas, quindi per calcolare la pressione si può utilizzare la legge generale. Va però prestata attenzione alle unità di misura. 28.6 g di O₂ corrispondono ad un numero di moli pari a $n = \frac{28.6 \text{ g}}{32.0 \text{ g/mol}} = 0.894 \text{ mol}$. Inoltre 125°C corrispondono ad una temperatura assoluta di 398 K. La pressione è quindi:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{0.894 \text{ [mol]} \cdot 0.08206 \text{ [Latm/(K mol)]} \cdot 398 \text{ [K]}}{20.0 \text{ [L]}} = 1.46 \text{ atm}$$

6.6 Un frigorifero con una porta delle dimensioni 80cm x 50cm viene chiusa a temperatura ambiente e raffreddato a 5°C. Calcolare la forza sulla porta dopo il raffreddamento.

Sappiamo che la forza si calcola con:

$$P = F/A$$

La pressione in questo caso viene dalla differenza quindi:

$$F = A \cdot \Delta P = A \cdot (P_1 - P_2)$$

Per calcolare la seconda pressione usiamo la legge generale dei gas. Sapendo che la quantità di sostanze e anche il volume sono gli stessi prima e dopo raffreddare si sa che:

$$\frac{n_1}{V_1} = \frac{n_2}{V_2}$$

Usando la formula

$$\frac{P}{RT} = \frac{n}{V}$$

Si può scrivere:

$$\frac{n_1}{V_1} = \frac{n_2}{V_2} \rightarrow \frac{P_1}{RT_1} = \frac{P_2}{RT_2}$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow P_2 &= P_1 \cdot \frac{T_2}{T_1} \\ &= 1013 \text{ mbar} \cdot \frac{(273,15 + 5) \text{ K}}{(273,15 + 25) \text{ K}} \\ &= \underline{\underline{945,05 \text{ mbar}}} \end{aligned}$$

E così calcolare la forza:

$$\begin{aligned}
 \rightarrow F &= A \cdot \Delta P = A \cdot (P_1 - P_2) \\
 &= 0,5\text{m} \cdot 0,8\text{m} \cdot (1013\text{mbar} - 945,05\text{mbar}) \\
 &= 0,4\text{m}^2 \cdot 67,95\text{mbar}
 \end{aligned}$$

$$* 1\text{bar} = 10^5 \text{ N/m}^2$$

$$\begin{aligned}
 \rightarrow F &= 0,4\cancel{\text{m}^2} \cdot 67,95 \cdot 10^2 \cancel{\text{N/m}^2} \\
 &= \underline{\underline{2718,1\text{N}}}
 \end{aligned}$$