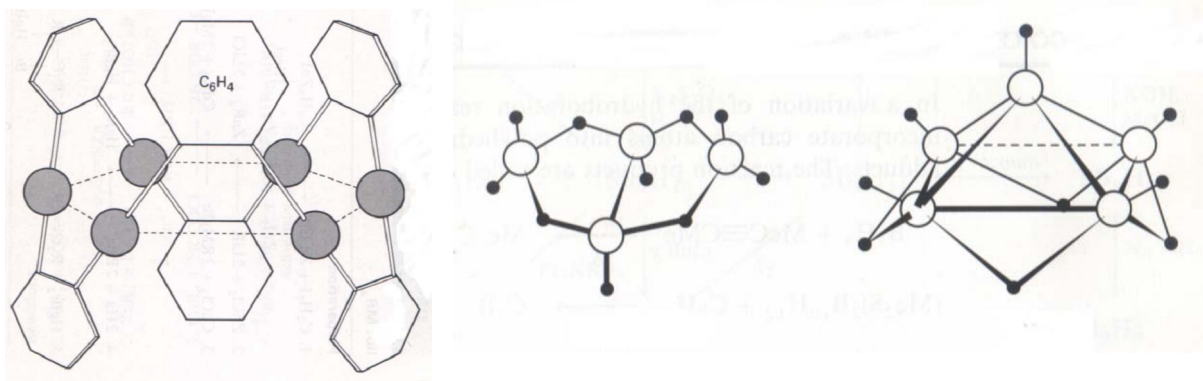


Struttura e proprietà atomiche. Stabilire per gli ioni Mo^{3+} e il Mo^{4+} i) la carica effettiva Z_{eff} che agisce sugli elettroni di valenza secondo le regole di Slater e ii) per entrambi il numero totale dei microstati, il Termine fondamentale e la sua degenerazione.

Simmetria e geometria molecolare. Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR, il gruppo puntuale e la polarità per le seguenti specie: AsBr_4Cl , OTeF_4 , BiF_3Cl , $(\text{CH}_3)_2\text{PF}_3$, ciclo- $\text{P}_3\text{O}_9^{3-}$, S_2Cl_2 . Stabilire anche il gruppo puntuale del complesso organomercurico (sinistra) e dei due borani (destra) sotto illustrati.

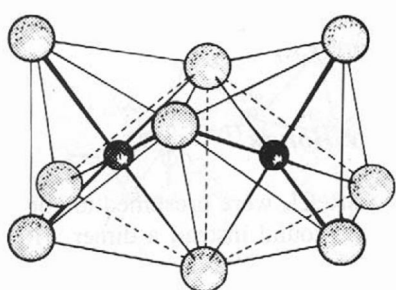
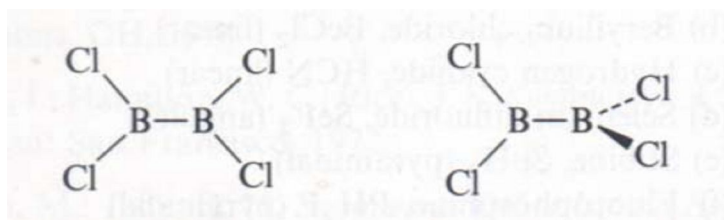


Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri. Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali p dei clori nella molecola SiFCl_3 .

Molecole covalenti. Mentre in fase gassosa esiste la specie molecolare PCl_5 in fase solida è invece stabile il composto ionico $[\text{PCl}_4^+][\text{PCl}_6^-]$ che deriva dal trasferimento di uno ione Cl^- tra due molecole. Costruire uno schema di orbitali molecolari σ per le due specie ioniche (usando gli orbitali atomici s e p dell'atomo centrale e un orbitale di tipo σ per gli atomi di cloro), determinando le simmetrie e le proprietà nodali delle SALC e confrontare l'ordine di legame medio P-Cl nelle due specie.

Struttura e proprietà atomiche. Dalla relazione energia/carica $E(\text{eV}) = aq + bq^2$ stabilire i) il valore del potenziale di seconda ionizzazione di Sn; ii) per quale carica q l'elettronegatività di un atomo di Sn e di un atomo di Cl diventano uguali; iii) quali sono le cariche atomiche nelle molecole SnCl_2 e ClF_5 (Sn: $a = 4.32$, $b = 3.02$; Cl: $a = 8.31$, $b = 4.7$; F: $a = 10.38$, $b = 7.04$).

Simmetria e geometria molecolare. Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR, il gruppo puntuale e la polarità per le seguenti specie: AsBr_3Cl_2 , BiFCl_3^- , Cl_2IO^+ , I_2Cl_6 , SbCl_5^{2-} , $(\text{Py})_2\text{TeOCl}_2$ (Py = piridina). Assegnare anche il gruppo puntuale al complesso di W (sinistra) e ai due isomeri rotazionali di B_2Cl_4 (destra) sotto illustrati.

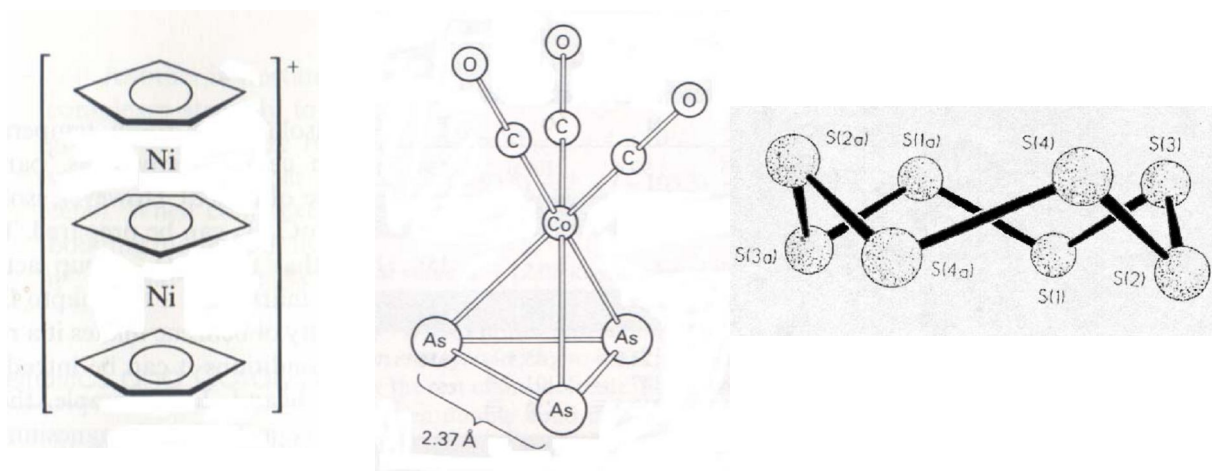
 $[\text{W}_2\text{Cl}_9]^{3-}$ 

Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri. Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali s dei fluoruri in un complesso MF_8 in geometria antiprismatica quadrata.

Molecole covalenti. Costruire degli schemi di orbitali molecolari π per molecole cicliche planari E_4 ed E_5 discutendo le simmetrie e le proprietà nodali delle SALC. Utilizzare tali schemi per razionalizzare il legame chimico nelle specie reali o ipotetiche $\text{Sb}_2\text{Bi}_2^{2-}$, Bi_4^{2+} , Se_4 , $\text{B}_2\text{C}_3\text{H}_5^-$, $\text{N}_3\text{C}_2\text{H}_2^-$, P_5^- e per stabilire l'ordine di legame medio tra atomi adiacenti.

Struttura e proprietà atomiche. Stabilire per gli ioni Rh^{2+} e il Rh^{3+} i) la carica effettiva Z_{eff} che agisce sugli elettroni di valenza secondo le regole di Slater e ii) per entrambi il numero totale dei microstati, il Termine fondamentale e la sua degenerazione.

Simmetria e geometria molecolare. Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR, il gruppo puntuale e la polarità per le seguenti specie: AsF_3Cl_2 , XeF_4O , ICl_2^+ , $\text{C}(\text{CF}_2)_2$, $\text{Se}_2\text{O}_4^{2-}$, XeOF_2 . Assegnare anche il gruppo puntuale ai due complessi (sinistra) e alla molecola S_8 (destra) sotto illustrati.

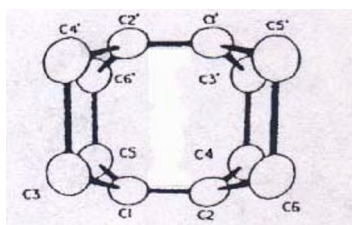
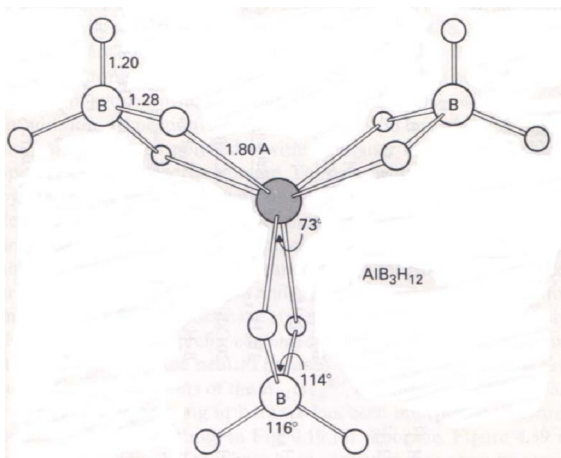


Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri. Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali p dei fluori nella molecola XeF_4O .

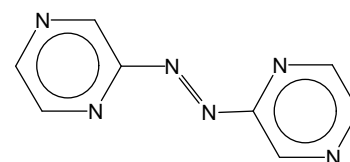
Molecole covalenti. Costruire uno schema di orbitali molecolari σ per le specie ottaedriche AX_6^{q-} , usando come set di base per A gli orbitali s e p, e per ogni X un orbitale di tipo σ rivolto verso l'atomo centrale, stabilendo le simmetrie delle SALC. Applicare lo schema alle specie reali o ipotetiche TeCl_6 , SeI_6^{2-} e XeO_6^{4-} . Per ciascuna specie definire la natura dell'HOMO e determinare l'ordine di legame medio A-X.

Struttura e proprietà atomiche. Dalla relazione energia/carica $E(\text{eV}) = aq + bq^2$ stabilire i) il valore dell'energia di seconda ionizzazione e dell'affinità elettronica del Se; ii) per quale carica q l'elettronegatività di un atomo di Se e di un atomo di O diventano uguali; iii) quali sono le cariche atomiche nelle molecole SeO_2 e TeO_3 (Se: $a = 5.89$, $b = 3.86$; Te: $a = 5.49$, $b = 3.52$; O: $a = 7.54$, $b = 6.08$).

Simmetria e geometria molecolare. Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR, il gruppo puntuale e la polarità per le seguenti specie: AsF_2Cl_3 , F_2IO_2^- , BiCl_5^{2-} , IOF_5 , N_2F_2 , $\text{AlH}_3(\text{N}(\text{CH}_3)_3)_2$. Assegnare anche il gruppo puntuale alle tre specie sotto illustrate.



$\text{C}_{12}\text{H}_{16}$



Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri. Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali s degli idruri nella specie ReH_9^{2-} .

Molecole covalenti. La molecola BrF_3 autodissocia secondo la reazione:



Costruire per i due prodotti degli schemi di orbitali molecolari σ (usando gli orbitali atomici s e p del bromo e un orbitale di tipo σ degli atomi di fluoro), discutendo le simmetrie e le proprietà nodali delle SALC. Stabilire l'ordine di legame medio Br-F nei due casi.