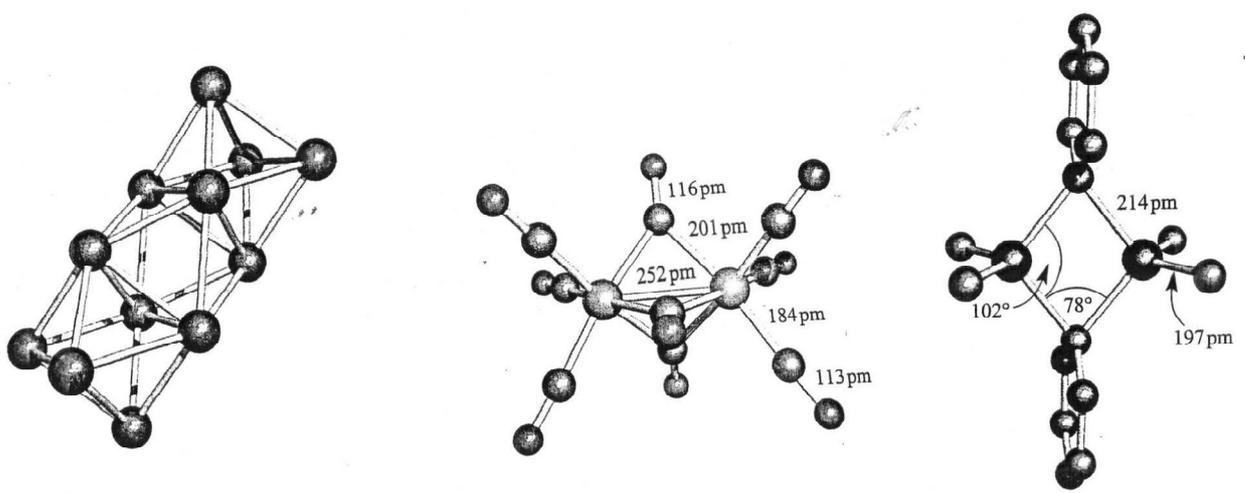
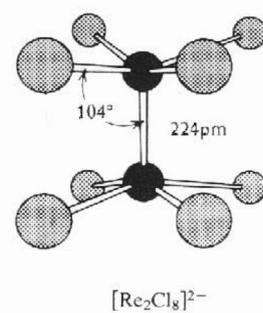


**Struttura e proprietà atomiche.** Dalla relazione energia/carica  $E(\text{eV}) = aq + bq^2$  stabilire i) il valore dell'energia di prima e seconda ionizzazione e dell'affinità elettronica dell'arsenico; ii) per quale carica  $q$  l'elettronegatività di un atomo di As e di un atomo di Cl diventano uguali; iii) quali sono le cariche atomiche nelle molecole  $\text{AsCl}_3$  e  $\text{AsCl}_5$  (As:  $a = 5.30$ ,  $b = 4.50$ ; Cl:  $a = 8.30$ ,  $b = 4.68$ ).

**Simmetria e geometria molecolare.** Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR e il gruppo puntuale per le seguenti specie:  $\text{BiF}_4\text{Cl}^{2-}$ ,  $\text{S}_2\text{Cl}_2$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{TeBr}_2$ ,  $\text{SF}_5(\text{OH})$ ,  $\text{SbFCl}_4$ . Stabilire anche il gruppo puntuale delle tre specie sotto illustrate..



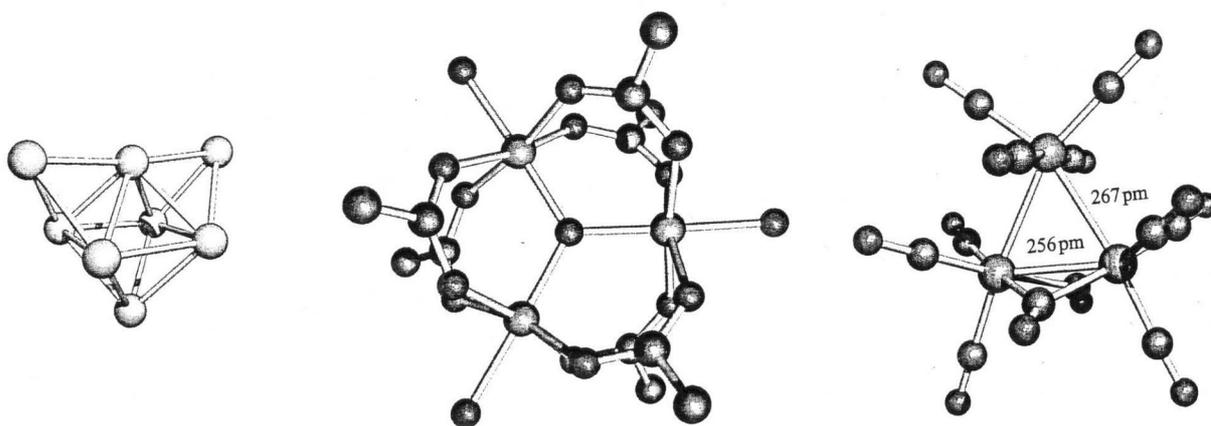
**Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri.** Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali  $s$  degli atomi di cloro nel composto di renio qui illustrato..



**Molecole covalenti.** Costruire uno schema di orbitali molecolari  $\sigma$  per le specie ottaedriche  $\text{AX}_6^{q+}$ , usando come set di base per A gli orbitali  $s$  e  $p$ , e per ogni X un orbitale di tipo  $\sigma$  rivolto verso l'atomo centrale, stabilendo le simmetrie delle SALC. Applicare lo schema alle specie ottaedriche reali o ipotetiche  $\text{SeCl}_6$ ,  $\text{TeI}_6^{2-}$  e  $\text{XeO}_6^{4-}$ . Per ciascuna specie definire la natura dell'HOMO e determinare l'ordine di legame medio A-X.

**Struttura e proprietà atomiche.** Stabilire per gli ioni  $\text{Ru}^{2+}$  e  $\text{Ru}^{3+}$  i) la carica effettiva  $Z_{\text{eff}}$  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, i livelli derivanti dall'accoppiamento spin-orbita.

**Simmetria e geometria molecolare.** Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR e il gruppo puntuale per le seguenti specie:  $(\text{CH}_3)_2\text{TeCl}_4$ ,  $\text{SbF}_2\text{Cl}_3$ ,  $[\text{C}(\text{CH}_2)_2]$ ,  $\text{IF}_2^+$ ,  $\text{IF}_2^-$ . Stabilire anche il gruppo puntuale delle tre specie sotto illustrate..

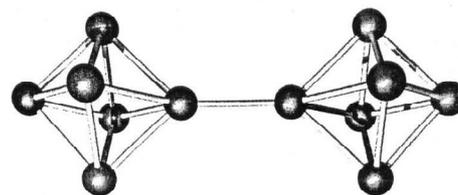
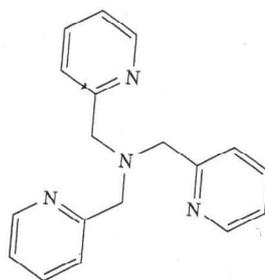
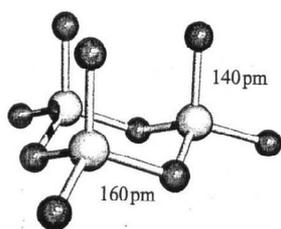


**Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri.** Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali s dei fluori a) nel composto  $\text{BrF}_5$  e b) in un complesso  $\text{MF}_6$  in geometria prismatica trigonale.

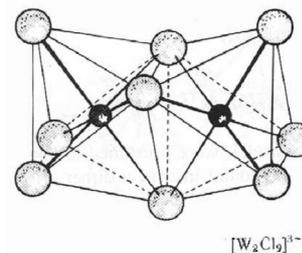
**Molecole covalenti.** Costruire degli schemi di orbitali molecolari  $\pi$  per molecole cicliche  $E_4$ , ed  $E_6$ , stabilendo le simmetrie delle SALC. Applicare gli schemi alle specie cicliche reali o ipotetiche  $\text{Tl}_2\text{Bi}_2^{2-}$ ,  $\text{Se}_2\text{S}_2^{2+}$ ,  $\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$ ,  $\text{S}_6^{2+}$ . Per ciascuna specie definire la natura dell'HOMO e determinare l'ordine di legame medio E-E. Razionalizzare infine la struttura elettronica delle specie cicliche ipotetiche  $\text{S}_4\text{N}_2$ ,  $\text{S}_5\text{N}^-$  e  $\text{S}_5\text{N}^+$ , discutendo l'ordine di legame medio e la loro stabilità come molecole cicliche.

**Struttura e proprietà atomiche.** Dalla relazione energia/carica  $E(\text{eV}) = aq + bq^2$  stabilire i) il valore del potenziale di prima e seconda ionizzazione e l'affinità elettronica di I; ii) per quale carica  $q$  l'elettronegatività di un atomo di F diviene uguale a quella di un atomo di I neutro; iii) quali sono le cariche atomiche nelle molecole  $\text{IF}_5$  e  $\text{IF}_7$  (I:  $a = 6.76$ ,  $b = 3.69$ ; F:  $a = 10.38$ ,  $b = 7.04$ ).

**Simmetria e geometria molecolare.** Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR e il gruppo puntuale per le seguenti specie:  $\text{AsCl}_2\text{Br}_2^-$ ,  $\text{XeF}_4\text{O}$ ,  $\text{N}_2\text{O}_5$ ,  $\text{XeO}_3$ ,  $\text{P}(\text{CF}_3)_2(\text{CH}_3)_3$ . Stabilire anche il gruppo puntuale delle tre specie sotto illustrate..



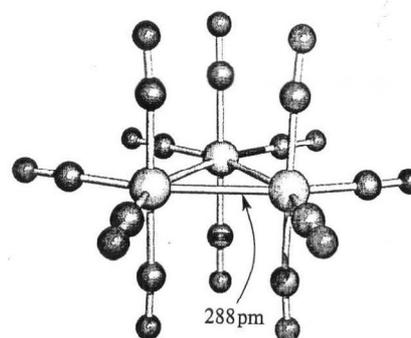
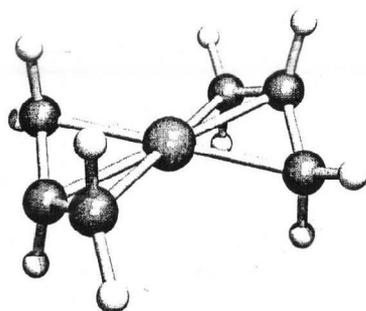
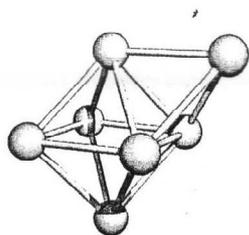
**Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri.** Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali  $s$  degli atomi di cloro nel composto di W qui illustrato.



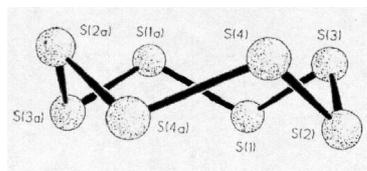
**Molecole covalenti.** Costruire degli schemi di orbitali molecolari  $\pi$  per molecole cicliche  $E_4$ , ed  $E_6$ , stabilendo le simmetrie delle SALC. Applicare gli schemi alle specie reali o ipotetiche  $\text{Tl}_2\text{Sb}_2^{2-}$ ,  $\text{Sb}_2\text{S}_2$ ,  $\text{S}_3\text{N}_3^-$ ,  $\text{S}_6$ . Per ciascuna specie definire la natura dell'HOMO e determinare l'ordine di legame medio E-E. Stabilire infine se è più stabile come molecola ciclica  $\text{S}_4$ ,  $\text{S}_4^{2+}$  o  $\text{S}_4^{2-}$ .

**Struttura e proprietà atomiche.** Stabilire per gli ioni  $\text{Nb}^{2+}$  e  $\text{Nb}^{3+}$  i) la carica effettiva  $Z_{\text{eff}}$  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, i livelli derivanti dall'accoppiamento spin-orbita.

**Simmetria e geometria molecolare.** Stabilire la formula di Lewis, la geometria secondo la VSEPR e il gruppo puntuale per le seguenti specie:  $\text{P}_2\text{Br}_4$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{TeCl}_2$ ,  $(\text{Ph})\text{TeBr}_4^-$  (Ph = fenile),  $\text{PF}_2\text{Cl}(\text{CH}_3)_2$ ,  $\text{SeF}_4^{2-}$ . Stabilire anche il gruppo puntuale delle tre specie sotto illustrate..



**Gruppi puntuali e Tabella dei Caratteri.** Determinare la rappresentazione riducibile e le rappresentazioni irriducibili del set di orbitali s degli atomi S nel ciclo  $\text{S}_8$  qui illustrato.



**Molecole covalenti.** Costruire uno schema generale di orbitali molecolari per specie a geometria trigonale planare del tipo  $\text{XO}_3^q$  ( $q$  = eventuale carica) utilizzando come set di base per X gli orbitali s e p e per l'ossigeno un orbitale atomico di tipo  $\sigma$  e uno di tipo  $\pi$ . Discutere le simmetrie e le proprietà nodali delle SALC. Applicare lo schema per discutere specie come  $\text{BF}_3$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{TeO}_3$ . Discutere infine le conseguenze della riduzione dell'ultima specie.