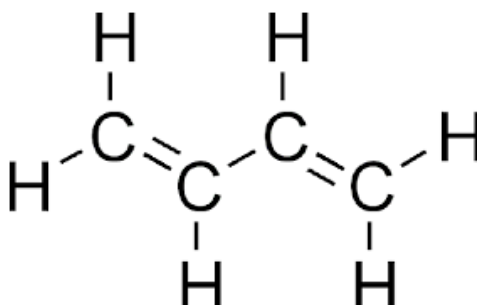


## BUTADIENE – Buca Infinita

La molecola di butadiene è una catena così composta:



Ci sono 4 elettroni in totale che vengono messi in condivisione dagli atomi di carbonio e che vanno a popolare degli stati che si estendono su tutta la molecola (vedremo alla fine del corso cosa significa questo, per ora confido sulle basi che avete dai corsi di chimica generale). In un modello molto semplice che descrive la molecola, questi elettroni possono essere considerati liberi di muoversi dentro questi stati. Possiamo pensarli come dentro una buca infinita di lunghezza a pari alla lunghezza della molecola.

La lunghezza della molecola sarà data da:

- 2 lunghezze tipiche del legame doppio C=C:  $2 \times 1.35 \text{ \AA}$
- 1 lunghezza tipica del legame singolo C-C:  $1 \times 1.54 \text{ \AA}$
- 2 raggi covalenti di C (bordi della molecola):  $2 \times 0.77 \text{ \AA}$

La lunghezza totale risulta  $a = 5.78 \text{ \AA}$

Avremo perciò livelli della buca  $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

I 4 elettroni occuperanno i primi due livelli (2 elettroni per livello, con spin opposto, anche qui ci arriveremo, ma lo saprete già). Il primo livello libero sarà quindi quello con  $n=3$ , e la distanza tra questo e il livello 2 vale:

$$\Delta E_{2,3} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (3^2 - 2^2) = 9.02 \cdot 10^{-19} \text{ J} \simeq 5.63 \text{ eV}$$

Il dato sperimentale è di  $\Delta E_{2,3} = 5.71 \text{ eV}$ , quindi l'accordo è ottimo se pensiamo alle approssimazioni che abbiamo fatto per descrivere la molecola e la sua struttura elettronica.

L'Energia che abbiamo calcolato, ovvero la distanza tra lo stato occupato più alto (HOMO, Highest Occupied Molecular Orbital) e lo stato inoccupato più basso (LUMO, Lowest Unoccupied Molecular Orbital), ha un'importanza fondamentale nelle applicazioni tecnologiche. Ci dice a che energia una molecola è in grado di assorbire o emettere un fotone. Se voglio costruire degli schermi su base organica ad esempio, voglio delle molecole in grado di emettere luce visibile quando si diseccitano dopo essere state portate in uno stato eccitato. Nel nostro esempio, l'energia di emissione, 5.7 eV, cade nell'ultravioletto. Se volessimo fare delle applicazioni nel visibile, dovremmo ad esempio allungare la catena, in modo da avvicinare tra loro i livelli energetici....